

Untersuchungen zur Kristallchemie der Hydratationsprodukte borathaltiger Zemente

Den Naturwissenschaftlichen Fakultäten der
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
zur
Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt von
Richard Wenda
aus Fürth/Bay.

Diss. Erlangen

1984 MA 16

Untersuchungen zur Kristallchemie der Hydratationsprodukte borathaltiger Zemente

Den Naturwissenschaftlichen Fakultäten der
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
zur
Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt von
Richard Wenda
aus Fürth/Bay.

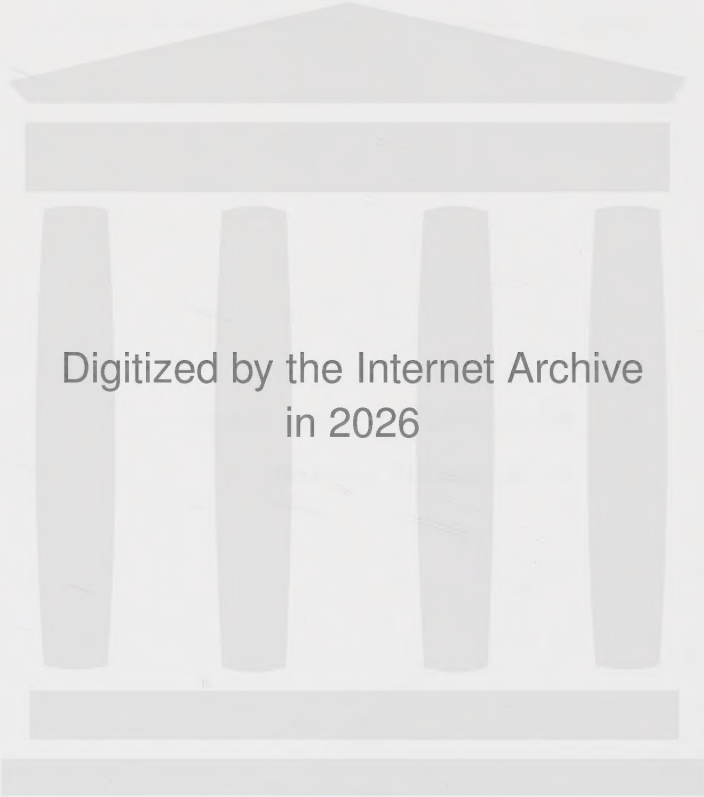
Als Dissertation genehmigt von den Naturwissenschaftlichen
Fachbereichen der Universität Erlangen-Nürnberg

Tag der mündlichen Prüfung : 13. Juli 1984

Vorsitzender der Promotionskommission : Prof. Dr. K. Jacobs
Erstberichterstatter : Prof. Dr. H.-J. Kuzel
Zweitberichterstatter : Prof. Dr. H. Burzlaff

Meiner Frau und meinen Eltern

in Dankbarkeit gewidmet



Digitized by the Internet Archive
in 2026

INHALTSVERZEICHNIS

		Seite
0.	Nomenklatur	0
1.	Einleitung	1
1.1.	Einführung in den Problemkreis	1
1.2.	Aufgabenstellung	4
1.3.	Strukturbeschreibung der Calciumaluminat- und Calciumferrithydrate	5
1.3.1.	Laminare Verbindungen	5
1.3.2.	Ettringitverbindungen	9
2.	Experimentelle Methoden	12
2.1.	Darstellung der Proben	12
2.2.	Behandlung der Proben	15
2.3.	Untersuchungsverfahren	16
2.3.1.	Röntgenographie	16
2.3.2.	Infrarot- und Ramanspektroskopie	17
2.3.3.	Licht- und Rasterelektronenmikroskopie	18
2.3.4.	Chemische Analyse	18
2.3.5.	Thermoanalytische Untersuchungen	19
3.	Ergebnisse	20
3.1.	Calciumaluminathydroxisalze	20
3.1.1.	Laminare Verbindungen	20
3.1.1.1.	System $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot nH_2O$ - $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$	20
3.1.1.1.1.	Ergebnisse bei $20^{\circ}C$	21
3.1.1.1.2.	Ergebnisse bei $40^{\circ}C$	26
3.1.1.1.3.	Ergebnisse bei $50^{\circ}C$	31
3.1.1.1.4.	Untersuchung von $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$	34

	Seite
3.1.1.2. System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaSO_4 \cdot nH_2O$	46
3.1.1.2.1. Ergebnisse bei $20^\circ C$	46
3.1.1.2.2. Ergebnisse bei $40^\circ C$	50
3.1.1.2.3. Untersuchung von $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot nH_2O$ und $C_3A \cdot (1-x)CaHBO_3 \cdot xCaSO_4 \cdot nH_2O$	55
3.1.1.3. System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$	61
3.1.1.3.1. Ergebnisse bei $20^\circ C$	61
3.1.1.3.2. Ergebnisse bei $40^\circ C$	65
3.1.1.3.3. Untersuchung der Mischkristalle $C_3A \cdot (1-x)CaHBO_3 \cdot xCaCl_2 \cdot (11,5-1,5x)H_2O$	70
3.1.1.4. System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O -$ $C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$	74
3.1.1.4.1. Ergebnisse bei $20^\circ C$	74
3.1.1.4.2. Ergebnisse bei $40^\circ C$	81
3.1.1.4.3. Ergebnisse bei $60^\circ C$	86
3.1.1.4.4. Untersuchung von $C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$	92
3.1.1.5. System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$	96
3.1.1.5.1. Ergebnisse bei $20^\circ C$	96
3.1.1.5.2. Ergebnisse bei $40^\circ C$	102
3.1.1.5.3. Ergebnisse bei $60^\circ C$	106
3.1.1.5.4. Untersuchung von $C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$	111
3.1.2. Ettringite	115
3.1.2.1. Systeme Hydroxid-ettringit - Borat-ettringite	115
3.1.2.1.1. System $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O -$ $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O$	115
3.1.2.1.2. System $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot nH_2O -$ $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$	118

3.1.2.1.3.	Untersuchung von $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$	120
3.1.2.1.4.	Untersuchung von $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O$	126
3.1.2.1.5.	Untersuchung von $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$	130
3.1.2.2.	System $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O - C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 36H_2O$	135
3.1.2.2.1.	Untersuchung von $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30-36H_2O$	138
3.1.2.3.	Systeme Boratettringite - Sulfatettringit	143
3.1.2.3.1.	System $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O - C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 36H_2O$	143
3.1.2.3.2.	System $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O - C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$ bei $4^\circ C$	148
3.1.2.3.3.	System $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O - C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$ bei $20^\circ C$	150
3.1.2.4.	Systeme Hydroxidettringit - Chloridettringit und Boratettringite - Chloridettringit	152
3.1.2.4.1.	System $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O - C_3A \cdot 3CaCl_2 \cdot nH_2O$	152
3.1.2.4.2.	System $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O - C_3A \cdot 3CaCl_2 \cdot nH_2O$	155
3.1.2.4.3.	System $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O - C_3A \cdot 3CaCl_2 \cdot nH_2O$	157
3.1.2.5.	Systeme Boratettringite - Carbonatettringit	159
3.1.2.5.1.	System $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O - C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$	159
3.1.2.5.2.	System $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O - C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot nH_2O$	162
3.1.2.5.3.	Untersuchung von $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$	165

	Seite
3.2. Calciumferrithydroxisalze	170
3.2.1. System $C_3F.Ca(OH)_2.nH_2O - C_3F.CaHBO_3.11,5H_2O$	170
3.2.2. Untersuchung von $C_3F.CaHBO_3.11,5H_2O$	173
3.2.3. System $C_3F.CaHBO_3.11,5H_2O - C_3F.CaCl_2.10H_2O$	177
3.2.4. Untersuchung von $C_3F.CaCl_2.10H_2O$	182
4. Zusammenfassung und Diskussion	186
5. Tabellen	195
5.1. Gitterkonstanten der Bodenkörper	196
5.2. Indizierungen der untersuchten Verbindungen	234
6. Literaturverzeichnis	255

O. NOMENKLATUR

In der Zementchemie werden zur Vermeidung langer Formeln oft Abkürzungen der Oxide verwendet:

C : CaO ; A : Al₂O₃ ; F : Fe₂O₃ ; H : H₂O ; S : SiO₂

CA : CaO.Al₂O₃ ; C₃A : 3CaO.Al₂O₃ ; C₃S : 3CaO.SiO₂

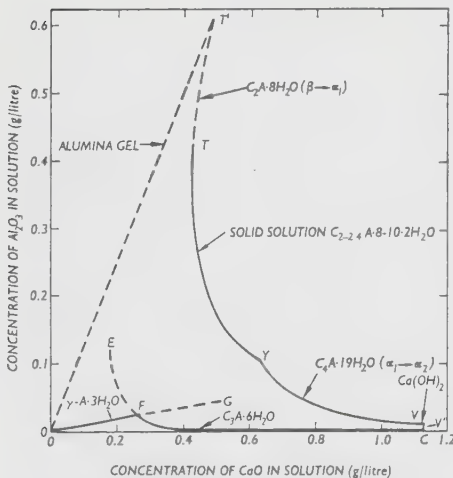
Für einige der untersuchten Verbindungen sind Trivialnamen gebräuchlich:

C ₃ A.Ca(OH) ₂ .19H ₂ O	{	Monohydroxid
C ₃ A.Ca(OH) ₂ .13H ₂ O		TCAH
C ₃ A.CaHBO ₃ .11,5H ₂ O		Monoborat
C ₃ A.CaCl ₂ .10H ₂ O		Monochlorid
C ₃ A.CaSO ₄ .12-16H ₂ O		Monosulfat
C ₃ A.CaCO ₃ .11H ₂ O		Monocarbonat
C ₃ A.O,5CaCO ₃ .0,5Ca(OH) ₂ .11,5H ₂ O		Halbcarbonat
C ₃ A.3Ca(OH) ₂ .33H ₂ O		Hydroxidtettringit
C ₃ A.Ca{B(OH) ₄ } ₂ .2Ca(OH) ₂ .36H ₂ O	{	Boratettringite
C ₃ A.2Ca{B(OH) ₄ } ₂ .Ca(OH) ₂ .30H ₂ O		
C ₃ A.3CaCl ₂ .nH ₂ O		Chloridettringit
C ₃ A.3CaSO ₄ .30-36H ₂ O		Sulfatettringit
C ₃ A.3CaCO ₃ .32H ₂ O		Carbonatettringit
C ₃ F.Ca(OH) ₂ .nH ₂ O		TCFH
C ₃ F.CaHBO ₃ .11,5H ₂ O		Fe - Monoborat
C ₃ F.CaCl ₂ .10H ₂ O		Fe - Monochlorid
C ₃ AH ₆		Hydrogranat
CH		Portlandit
AH ₃		Gibbsit

1. EINLEITUNG

1.1. Einführung in den Problembereich

Portlandzement setzt sich im wesentlichen aus den Klinkermineralien C_3S , C_2S , C_3A und C_4AF zusammen; Hauptbestandteile des Tonerdezements dagegen sind Calciumaluminat wie CA , $C_{12}A_7$ und C_4AF . Mit Wasser reagieren die Klinkerphasen zu Calciumsilikathydraten und komplexen Calciumaluminat- und -ferrithydraten. Der zeitliche Ablauf der Hydratation wird dabei vor allem von den reaktiven Calciumaluminaten bestimmt. Deren Hydratationsprodukte lassen sich im System $CaO - Al_2O_3 - H_2O$ darstellen (BUTTLER 1958).



System $CaO-Al_2O_3-H_2O$ at 25° (Jones and Roberts)

Abb. 1 :
Das System
 $CaO - Al_2O_3 - H_2O$
bei $25^\circ C$ nach
JONES u. ROBERTS (1962)
in LEA (1970)

Wie Abb. 1 zeigt, treten neben den stabilen Phasen $Ca(OH)_2$ (Portlandit), $Al(OH)_3$ (Gibbsit) und C_3AH_6 (Hydrogranat) metastabile Phasen mit unterschiedlichen CaO/Al_2O_3 - Werten auf. Es sind dies CAH_{10} , C_2AH_8 , C_4AH_{19} und $C_4A_3H_3$ mit verschiedenen polytypen Modifikationen und Hydratstufen (LEA 1970).

Entscheidend beeinflußt wird die Hydratation der Calciumaluminat durch die Anwesenheit weiterer Anionen, die entweder als Nebenbestandteile des Klinkers vorliegen oder bewußt zur Steuerung des Abbindeverhaltens zugegeben werden. Dabei bilden sich komplexe quaternäre Calciumaluminathydroxysalze. Sie lassen sich in zwei Grundtypen einteilen:

- a) laminare pseudohexagonale Verbindungen mit plättchenförmigem Habitus vom Typ



- b) trigonale Ettringitverbindungen mit nadeligem bis prismatischem Habitus



X entspricht einem einwertigen Anion wie OH^- , Cl^- ,

Y bedeutet ein zweifach geladenes Anion wie SO_4^{2-} , CO_3^{2-}

Al_2O_3 ist im Zement teilweise durch Fe_2O_3 ersetzt.

Aufgrund der technischen Bedeutung für die Erhärtung und Beständigkeit des Zements wurde diesen Verbindungen schon früh Aufmerksamkeit zuteil (MICHAELIS 1892 / CANDELOT 1892 / FRIEDEL 1897 / LERCH et al. 1929 / MYLIUS 1933). Ein besseres Verständnis der dabei ablaufenden Vorgänge wurde durch die neueren kristallchemischen Arbeiten von HENNING (1966), DANOWSKI (1966), DOSCH (1967), KUZEL (1969), BUHLERT (1971) und KELLER (1971) erreicht. FISCHER (1977) und FISCHER und KUZEL (1982) berichteten über den Einfluß von CO_3^{2-} auf laminare Calciumaluminathydrate, PÖLLMANN (1980) und PÖLLMANN und KUZEL (1982) über Cl^- - haltige Verbindungen.

Aus dem im C_4AF gebundenen Fe - Anteil des Klinkers entstehen bei der Hydratation Calciumferrit- bzw. Calciumaluminatferrithydrate.

Der präparativen Darstellung sind allerdings nur solche Verbindungen gut zugänglich, bei deren Synthese lösliche Fe - Salze eingesetzt werden können. So wird von KUZEL (1968 und 1969) und LEA (1970) über den Einbau von Cl^- , Br^- , J^- , SO_4^{2-} und NO_3^- in Calciumferrithydrate berichtet. SELIGMANN und GREENING (1968) und SIMON (1984) konnten die entsprechenden CO_3^{2-} - Verbindungen darstellen.

Um den genormten Baustoff Zement optimal an den jeweiligen Verwendungszweck anzupassen, können beim Hydratationsprozeß Zusatzstoffe zugegeben werden, die den Verlauf von Erstarrung und Erhärtung steuern. Es handelt sich bei diesen Abbindesteuerern um Stoffe, die primär die aluminatischen Komponenten des Zements beeinflussen. Neben den lange bekannten Verbindungen CaSO_4 und CaCl_2 kommt dabei Borsäure bzw. Boraten einige Bedeutung zu (ALBRECHT/MANNHERZ 1967, VENUAT 1971). LIEBER (1972), LIEBER und RICHARTZ (1973) und UCHIKAWA (1977) legten Untersuchungen vor über den Einfluß von H_3BO_3 und Boraten auf Portlandzement und schnellhärtende Zemente. LIEBER stellt fest, daß kleine Mengen H_3BO_3 fast genauso wirken wie CaCl_2 , indem sie den Erstarrungszeitraum vorverlegen, ohne daß sie die Gefährlichkeit des CaCl_2 besitzen. Auch KRENKLER (1980), VENUAT (1971) und JOISEL (1967) reihen Borate unter Abbindebeschleuniger ein. DURIEZ (1958) hält Natriumborat sowohl für einen Erhärtungs- und Abbindebeschleuniger als auch für einen Verzögerer. UCHIKAWA (1977) findet bei der Zugabe von Borsäure zu "ultra rapid hardening cement" aus C_3S und $\text{C}_{11}\text{A}_7 \cdot \text{CaF}_2$ eine bessere Verarbeitbarkeit und höhere Anfangs- und Endfestigkeiten. Ähnliches berichtet JERSZOW (1967).

Nach einem Patent der CEMENTS LAFARGE, Paris (1972) sollen unter anderem Zugaben von 1 bis 5 % Calciumboraten zu Tonerdezement die unerwünschte Umwandlung des Hydrates CAH_{10} in C_3AH_6 bei Temperaturen über 25°C verhindern. Der bei dieser Umwandlung auftretende Festigkeitsabfall führt, verbunden mit Carbonatisierung, zur Spannungsrißkorrosion der Bewehrung und Zerstörung des Bauwerks (KEIL 1971).

Die Wirkung des B_2O_3 im Zementstein muß ebenfalls berücksichtigt werden, wenn Borate als Sinterhilfsmittel beim Klinkerbrand verwendet werden (KÜHL 1958).

Borhaltige Zemente sind auch wegen des hohen Neutroneneinfangsquerschnittes des $^{10}_5\text{B}$ von Interesse. Eine Anwendungsmöglichkeit ist als Neutronenabsorber in Abschirmbetonen denkbar, eventuell in Kombination mit schweren Elementen wie Barium (BRANISKI 1969, KUZEL 1979).

1.2. Aufgabenstellung

Ziel der vorliegenden Arbeit war es, einen Einblick in die Kristallchemie borathaltiger Calciumaluminathydroxisalze zu erhalten und Beziehungen zu anderen Verbindungen dieses Typs herzustellen.

Kristall- und zementchemisch relevant ist das Verhalten von Borat gegenüber Anionen wie OH^- , Cl^- , CO_3^{2-} und SO_4^{2-} .

Ein Kontakt mit diesen Anionen beim Abbinden des Zements oder bei späterer Umweltbeeinflussung ist am wahrscheinlichsten: OH^- ist durch den pH- Wert des Hydratationswassers vorgegeben, SO_4^{2-} kann durch den Verzögerer Gips eingebracht werden, die Anwesenheit von Cl^- kann durch Abbindebeschleuniger oder Streusalz hervorgerufen werden und CO_3^{2-} ist als Luft- CO_2 bei allen Prozessen zu berücksichtigen.

Es werden sowohl die betreffenden Systeme mit laminaren Verbindungen als auch Ettringitsysteme untersucht, um alle Möglichkeiten des Boreinbaus zu erfassen.

Für spätere Untersuchungen soll damit eine kristallchemische Grundlage zum Verständnis des Zementzusatzmittels Bor geschaffen werden.

1.3. Strukturbeschreibung der Calciumaluminat- und Calciumferrithydrate

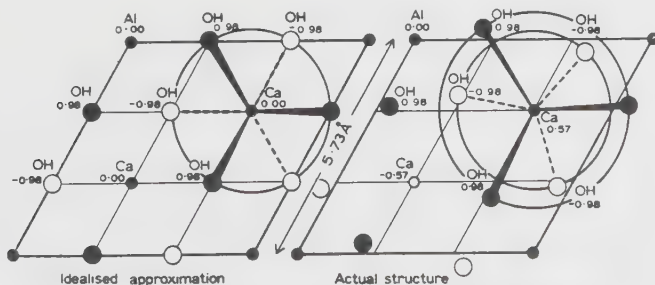
1.3.1. Laminare Verbindungen

Morphologie, Spaltbarkeit und Symmetrie der laminaren Calciumaluminathydrate ließen BRANDENBERGER (1933) Kristallstrukturen vermuten, die sich aus $\text{Ca}(\text{OH})_2$ - und $\text{Al}(\text{OH})_3$ - Schichten in wechselnden Verhältnissen aufbauen sollten.

Er nahm an, daß diese Schichten gegeneinander verdreht seien; das H_2O der Struktur sollte zeolithischer Natur sein.

TILLEY, MEGAW und HEY (1934) untersuchten den Hydrocalumit, ein natürliches Mineral der Zusammensetzung $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot x\text{CaCl}_2 \cdot y\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot z\text{CaCO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ (mit $x+y+z=1$) (FISCHER, KUZEL und SCHELLHORN 1980) und schlugen eine Schichtstruktur vor aus $\text{Ca}(\text{OH})_2$ - Hauptschichten, in denen jedes dritte Ca^{2+} fehlt, und Zwischenschichten mit H_2O , OH^- und Al^{3+} .

BUTTLE, DENT GLASSER und TAYLOR (1959) legten den in den Grundzügen bis heute gültigen Strukturvorschlag vor. Ihr Modell enthält positiv geladene Hauptschichten $(\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6)^+$, in denen oktaedrische Lücken geordnet von 2Ca^{2+} und Al^{3+} besetzt sind.



Structure of a single principal layer of composition $[\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6]^+$ in phases of the hydrocalumite group. Left: highly idealized approximation, consisting of a portlandite layer with ordered replacement of Ca by Al. Right: actual structure. Heights of atoms in the projections are in Å. Large circles indicate the distortion of the CaO_6 octahedron in the actual structure, which is sufficient to allow the coordination number of the Ca^{2+} ions to be raised to 7 by the approach of a water molecule (not shown) directly above or below them in the projection.

Abb. 2 : Struktur der Hauptschicht $(\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6)^+$;
Vergleich Ideal- und Realstruktur nach
TAYLOR (1973)

Der Ladungsausgleich wird im $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ von einem OH^- übernommen, das sich mit den H_2O - Molekülen in der Zwischenschicht befindet. Dieses Zwischenschichthydroxid kann in den Calciumaluminathydroxisalzen durch andere, ein- oder zweiwertige Anionen ersetzt werden (Zusammenstellung LEA 1970).

Dieser Strukturvorschlag wurde von allen nachfolgenden Arbeiten bestätigt (AHMED und TAYLOR 1967, KUZEL 1968, ALLMANN 1968). ALLMANN (1977) gibt die Koordinaten der Zwischenschichtatome des $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaSO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ an. KUZEL (1968) ersetzt Al^{3+} und Cl^- des Monochlorids $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ durch schwerere Atome wie Ga^{3+} bzw. Br^- , J^- und kann damit anschaulich die Schichtabfolge darstellen.

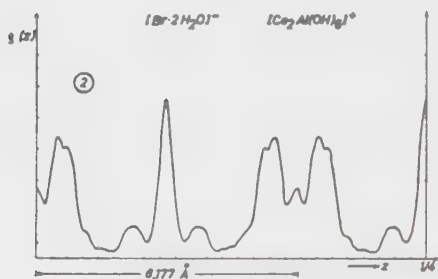
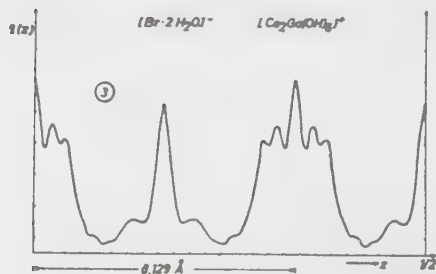
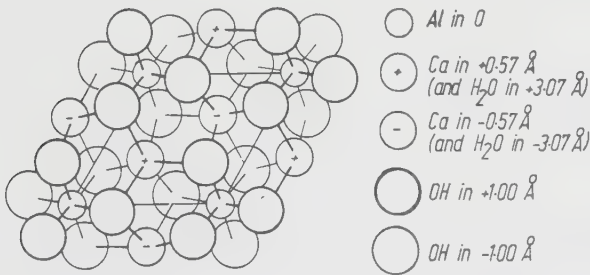


Abb. 3 :

Fourierprojektionen
längs der c - Achse von
 $(\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6) \cdot (\text{Br} \cdot 2\text{H}_2\text{O})$
 $(\text{Ca}_2\text{Ga}(\text{OH})_6) \cdot (\text{Br} \cdot 2\text{H}_2\text{O})$
(nach KUZEL 1969)



In der Hauptschicht der Calciumaluminathydroxisalze sitzen die dreifach geladenen Kationen (Al^{3+} ; kann ersetzt werden durch Fe^{3+} , Ga^{3+} , Cr^{3+} u.a.) auf $\bar{3}$ - Punktlagen in $z=0$ und sind durch OH^- oktaedrisch koordiniert. Die Ca^{2+} - Ionen sind um $0,57 \text{ \AA}$ aus der Nullage herausgerückt und erhalten dadurch ein H_2O der Zwischenschicht als siebenten Nachbarn (Abb. 4).



Brucite-like main layer $[\text{AlCa}_2(\text{OH})_6]^+$ projected onto the x, y-plane.

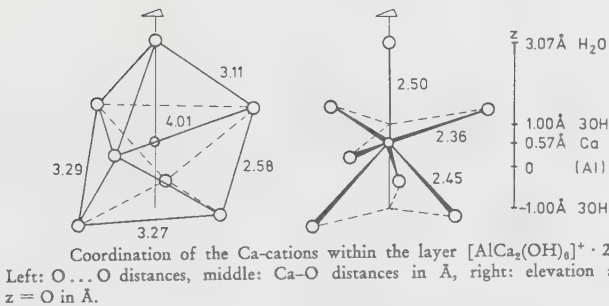


Abb. 4 : Struktur der Hauptschicht und Koordination des Ca^{2+} in den Calciumaluminathydroxisalzen nach ALLMANN (1977)

Zwischenschichten $\{Y.2H_2O\}$ mit einwertigen Anionen Y sind vollständig geordnet; in Schichten mit zweiwertigen Anionen wie z. B. $(1/2SO_4.3H_2O)$ muß ein Anion statistisch auf zwei Elementarzellen verteilt werden. Der jeweils freie Platz wird von einem H_2O eingenommen.

Bei Temperaturerhöhung werden in $(Y.2H_2O)$ die H_2O in einem Schritt abgegeben; Y^- nähert sich dadurch dem Ca^{2+} der Hauptschicht. In Schichten vom Monosulfattyp $(1/2 X. 3H_2O)$ gibt das H_2O Anlaß zu verschiedenen Hydratstufen.

Nach den Ergebnissen von BUTTLER, DENT GLASSER und TAYLOR (1959) muß bei den laminaren Verbindungen mit dem Auftreten polytyper Modifikationen und eindimensionaler Lagefehlordnung der Schichten gerechnet werden. So findet KUZEL (1969) zwei Modifikationen des Monochlorids, eine monokline mit Zweischichtstruktur und eine rhomboedrische mit Sechsschichtstruktur. C_4AH_{19} tritt ebenfalls in einer Zwei- und einer Sechsschichtstruktur auf (ARUJA 1961); C_4AH_{13} kommt eine Zwölfschichtstruktur zu (FISCHER 1977, FISCHER und KUZEL 1982).

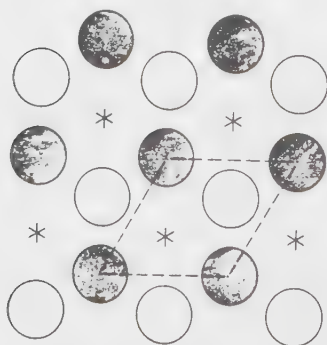


Abb. 5 :
Geordnete Zwischenschicht
der Calciumaluminathydroxi-
salze nach TAYLOR (1973)

Inter-layer material in phases of the hydrocalumite group, seen projected in the plane of the layers. Open and shaded circles denote respectively H_2O molecules attached to Ca^{++} ions on the upper surface of the principal layer below and on the lower surface of the principal layer above. Asterisks denote centres of cavities, which can be occupied by additional H_2O molecules or anions. Broken lines outline the unit cell or sub cell ($a = 5.7 \text{ \AA}$).

1.3.2. Ettringitverbindungen

Ettringit ist als natürliches Mineral vom Ettringer Bellerberg bekannt (LEHMANN 1874) und namensgebend für eine ganze Gruppe von natürlichen und synthetischen Verbindungen.

Nach Angaben BANNISTERs (1936) und SWANSONs (1958) kristallisiert (Sulfat-)Ettringit in der Raumgruppe $P\bar{3}1c$ mit $a_0:11,24 \text{ \AA}$ und $c_0:21,46 \text{ \AA}$.

Die ersten Strukturvorschläge zu dieser Verbindungsklasse stammen von WELIN (1956) für das Mineral Thaumasisit, in dem Al^{3+} durch Si^{4+} ersetzt ist. Einen weiteren Strukturvorschlag machen BEZJAK und JELENIC (1966) für Sulfatettringit.

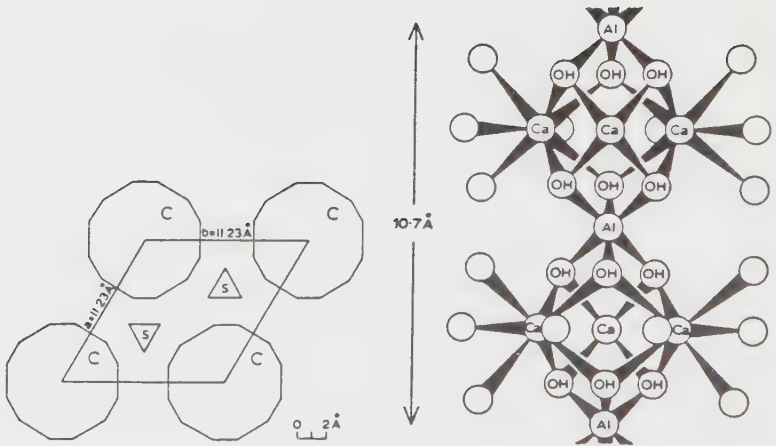
MOORE und TAYLOR (1968/1970) legen die bis heute gültige Strukturbeschreibung des Sulfatettringits vor; die Thaumasisitstruktur wird kurz darauf von EDGE und TAYLOR (1969/1971) gelöst. Nach diesen Untersuchungen kristallisieren die Minerale der Ettringitgruppe in $P\bar{3}1c$; die von BEZJAK und JELENIC angegebene Raumgruppe $P6_3/mmc$ wird als nicht mit der Struktur verträglich angesehen. Die von COURTOIS (1968) gefundene Raumgruppe $P\bar{6}2c$ wird als Folge von Verzwillingung oder Fehlordnungerscheinungen gedeutet.

Die Struktur baut sich auf aus Säulen der Zusammensetzung $(Ca_6\{Al(OH)_6\}_2 \cdot 24H_2O)^{6+}$, die parallel der c-Achse laufen. Die $Al(OH)_6$ -Oktaeder sind durch die Koordinationspolyeder des Ca^{2+} miteinander verbunden. Ca^{2+} bildet mit vier OH^- und vier H_2O die Koordinationszahl acht aus (Abb. 6).

In den zwischen den Säulen liegenden Kanälen befinden sich die SO_4 -Gruppen und weitere H_2O -Moleküle. Bei 35 % r.F. kann die Zusammensetzung eines Kanals mit $(3SO_4 \cdot 2H_2O)$ angegeben werden.

Auf der Grundlage dieser Strukturbeschreibung ist der mögliche Ersatz der Kationen und Anionen zu verstehen.

Das Al^{3+} der Säule kann ersetzt werden durch Cr^{3+} , Fe^{3+} (KUZEL 1969, BUHLERT 1971), Mn^{4+} (GRANGER 1965), oder Si^{4+} in oktaedrischer Koordination (MOENKE 1964, EDGE und TAYLOR 1969/1971).



Broad features of the ettringite structure, projected along the prism axis. The polygons C represent the columns, of empirical formula $[\text{Ca}_3\text{Al}(\text{OH})_6 \cdot 12\text{H}_2\text{O}]^{2+}$, while the triangles S represent the SO_4^{2-} ions and groups of H_2O molecules present in the channels. Fig. 6 (right). Ettringite: part of a single column projected on $(11\bar{2}0)$. Unmarked circles represent H_2O molecules. For clarity, H_2O molecules attached to Ca ions lying in the central vertical line of the figure are omitted, as are all the H atoms.

Abb. 7 : Ettringitstruktur nach MOORE und TAYLOR (1970)
aus TAYLOR (1973)

Die drei SO_4^{2-} - Gruppen der Kanäle können ausgetauscht werden gegen 3CrO_4^{2-} (BUHLERT 1971), 3CO_3^{2-} (CARLSON und BERMAN 1960), 6NO_3^- (BUHLERT 1971, PÖLLMANN 1984). EDGE und TAYLOR (1971) vermuten in dem von HURLBUT und BAUM (1960) gefundenen B_2O_3 - haltigen Ettringit BO_3^{3-} - Gruppen; IR - Spektren dazu fehlen aber. In einer neueren Arbeit (DUNN, PEACOR et al. 1983) wird das gleiche Material nochmals untersucht. Dabei werden $\text{B}(\text{OH})_4^-$ Gruppen angenommen; leider ebenfalls ohne spektroskopischen Beweis. KOLLMANN, STRÜBEL und TROST (1977) zeigen die für die Zementchemie interessante Mischkristallbildung von Sulfatettringit und Thaumassit; CARPENTER (1963) beschreibt orientierte Verwachsungen und nimmt begrenzte Mischbarkeit an.

Tab. 1 gibt eine Zusammenfassung der bisher gefundenen natürlichen Minerale der Ettringitgruppe.

SPECIES	COMPOSITION				<u>a</u> (Å)	<u>c</u> (Å)
ETTRINGITE	Ca ₆	Al ₂	(SO ₄) ₃	(OH) ₁₂ · 26H ₂ O	11.23	21.44
BENTORITE	Ca ₆	(Cr, Al) ₂	(SO ₄) ₃	(OH) ₁₂ · 26H ₂ O	22.35	21.41
STURMANITE	Ca ₆	(Fe ³⁺ Al) ₂	(SO ₄) ₂ (B(OH) ₄)	(OH) ₁₂ · 26H ₂ O	11.16	21.79
CHARLESITE	Ca ₆	(Al, Si) ₂	(SO ₄) ₂ (B(OH) ₄)	(OH) ₁₂ · 26H ₂ O	11.16	21.21
THAUMASITE	Ca ₆	Si ₂	(SO ₄) ₂ (CO ₃) ₂	(OH) ₁₂ · 24H ₂ O	11.04	10.39
JOURAVSKITE	Ca ₆	Mn ₂	(SO ₄) ₂ (CO ₃) ₂	(OH) ₁₂ · 24H ₂ O	11.06	10.50

Tab. 1 : Natürliche Minerale der Ettringitgruppe nach
DUNN, PEACOR et al. (1983)

2. EXPERIMENTELLE METHODEN

2.1. Darstellung der Proben

Die zur Darstellung der Calciumaluminat- und Calciumferrit-hydroxisalze benötigten Ausgangssubstanzen sind im folgenden zusammengestellt.

Soweit es sich nicht um käufliche Reagenzien handelt, ist die Darstellung angegeben.

CaO	: Glühen von CaCO_3 p.a. bei 1200°C (12 h)
$\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$	: Sintern von CaCO_3 p.a. und $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ reinst bei 1400°C (3-4 d); Feinstmahlung und Verwendung der Fraktion $< 50\mu\text{m}$
$\alpha\text{-Al}(\text{OH})_3$	: Bayerit nach FRICKE und SCHMÄH (1946)
$\text{NaAl}(\text{OH})_4$	: Lösung von Al-Blech p.a. in NaOH
$2\text{CaO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$	: Sintern von CaCO_3 p.a. und Fe_2O_3 p.a. oder $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ bei 1000°C (3 d); Feinstmahlung und Verwendung der Fraktion $< 50\mu\text{m}$
$\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	: p.a. MERCK
$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	: " "
CaCO_3	: " "
NaCl	: " "
$\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$	: " "
Na_2CO_3	: " "
$\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$	: " "
H_3BO_3	: " "
H_2O	: bidest., carbonatfrei
$\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11}$	: Saccharose $\hat{=}$ handelsüblicher Rohrzucker

Eine Zusammenfassung bisher bekannter Verfahren zur Darstellung von Calciumaluminathydraten findet sich bei KUZEL (1969) und FISCHER (1977).

Eine der in dieser Arbeit verwendeten Methoden geht von der Reaktion von $\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$ oder $\text{Al}(\text{OH})_3$ (Bayerit) mit CaO und den entsprechenden Anionen in CO_2 - freiem Wasser aus.

Um die CO_2 - Kontamination während der mehrmonatigen Reaktionszeit so gering wie möglich zu halten, werden die Polyäthylenreaktionsgefäße in größeren, mit Natronkalk gefüllten Behältern aufbewahrt. Zur Steigerung der Reaktionsgeschwindigkeit können die Proben auf einem Rollltisch oder Rüttler bewegt werden. Die Syntheseprodukte werden in einer Glovebox unter N_2 abfiltriert und sofort bei 100 % r.F. geröntgt. Nach dem Trocknen über gesättigter CaCl_2 - Lösung auf 35 % r.F. sind die Präparate etwas weniger carbonatempfindlich und können weiter untersucht werden.

In dieser Arbeit wird ein weiteres Verfahren angewandt, das im folgenden kurz als "Saccharatmethode" bezeichnet werden soll. Der Grundgedanke hierzu stammt aus der Arbeit von CARLSON und BERMAN (1960).

Die Methode beruht darauf, daß die geringe Löslichkeit des CaO in Wasser von 0,13 g/l durch den Zusatz von Saccharose bis auf das zweihundertfache gesteigert werden kann. Dabei bilden sich Additionsverbindungen der Art $\text{C}_{12}\text{H}_{22}\text{O}_{11} \cdot 1-3\text{CaO}$ (RÖMPP 1966), die das gebundene CaO auch wieder abgeben können. Eine Variante dieser Methode wird bei der industriellen Umkristallisation von Rohrzucker verwendet.

Das zur Bildung der Komplexsalze benötigte Al_2O_3 wird in Form einer Natriumaluminatlösung, die entsprechenden Anionen als Natriumsalze eingebracht. B_2O_3 kann auch als H_3BO_3 zugegeben werden. Durch das Zusammentreffen hoher Anionen- und niedriger Kationenkonzentration ist diese Methode für die Darstellung von Ettringiten besonders geeignet.

Laminare Phasen werden nicht gebildet.

Die nach einigen Stunden bis zu mehreren Tagen ausgefallenen Ettringite werden unter Schutzgas N_2 filtriert, mit viel H_2O nachgewaschen und mit Aceton getrocknet. Na^+ und Zucker können quantitativ entfernt werden.

Die Darstellung der Calciumferrithydrate erfolgt über die Reaktion von $2CaO \cdot Fe_2O_3$ mit CaO und den entsprechenden Anionen. Da die Löslichkeit der Calciumferrite wesentlich geringer ist als die der Calciumaluminate, muß C_2F bis zu der Größenordnung von $10 \mu m$ aufgemahlen werden, um akzeptable Reaktionszeiten zu erhalten.

2.2. Behandlung der Proben

Die Untersuchung der Calciumaluminat- und -ferrithydroxide macht einige Vorkehrungen gegen die Kontamination der Präparate durch Luft - CO_2 notwendig. Filtration, Trocknung und Präparation werden in einer N_2 - gespülten Glovebox unter CO_2 - Ausschluß durchgeführt (Bild 1).

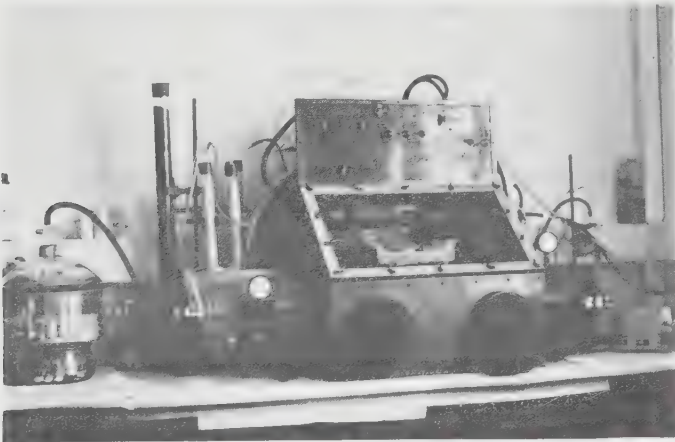


Bild 1 : Glovebox

Für röntgenographische Untersuchungen der Proben bei 100 % r.F. kann eine Klimakammer in die Box eingebracht und beschickt werden (FISCHER 1977).

Die getroffenen Maßnahmen erlauben es, den CO_2 - Einfluß auf die Syntheseprodukte gering zu halten.

Abstriche müssen bei der IR - Präparation gemacht werden (HENNING 1966): im IR - Spektrum ist fast immer die $\nu_3\text{-CO}_3$ - Schwingung zu erkennen; die Nachweisgrenze für CO_3^{2-} liegt bei der IR - Spektroskopie allerdings sehr niedrig (GÜNZLER/BÖCK 1975).

2.3. Untersuchungsverfahren

2.3.1. Röntgenographie

Die röntgenographische Untersuchung der Syntheseprodukte wurde zur Identifizierung, Gitterkonstantenberechnung und Raumgruppenbestimmung durchgeführt. Dazu standen Pulverdiffraktometer von PHILIPS und SIEMENS, sowie Guinier-, Precession- und Weissenbergkameras von ENRAF-NONIUS zur Verfügung. Bis auf die Precessionkamera, die mit Mo K_α - Strahlung betrieben wird, arbeiten alle Röntgengeräte mit Cu K_α - Strahlung.

Bei den Pulverpräparaten wurde Silicium 99,999 % ($a_0: 5,4308 \text{ \AA}$) als innerer Standard zugegeben. Die korrigierten und indizierten 2-Theta-Werte der Diffraktometer- und Guinieraufnahmen wurden durch least-squares-Programme an den Rechnern pdp 8 von DIGITAL INSTRUMENTS und Alphatronic P2 von TRIUMPH ADLER verfeinert.

Reflexaufspaltungen können, wie am Beispiel des Monoborats gezeigt wird, oft nur durch Guinieraufnahmen sichtbar gemacht werden. Auch in Systemen mit Mischungslücken ist die Trennung der Phasen mit Diffraktometeraufnahmen oft nicht befriedigend durchzuführen.

Bei der Präparation der Proben bei 100 % r.F. entstehen durch den plättchenförmigen Habitus der laminaren Phasen ausgeprägte Textureffekte, die die nichtbasalen Reflexe unterdrücken und die Indizierung erschweren. Nach der Trocknung auf 35 % r.F. lassen sich durch Verwendung der Schütttrahmentchnik oder durch Guinieraufnahmen auch die nichtbasalen Reflexe mit ausreichender Intensität erhalten.

Einkristallaufnahmen des Monoborats benötigen aufgrund des sehr kleinen Streuvolumens der verwendeten Kristalle sehr lange Belichtungszeiten, u. U. bis zu drei Wochen. Erst durch Verwendung von Verstärkerfolien auf Seltenerd-basis der Firma SIEMENS (DEGENHARDT 1981) gelang es, bei Precessionsaufnahmen die Belichtungszeiten bei maximal 20 Stunden zu halten.

Untersuchungen mit der Röntgenheizkammer lieferten in Verbindung mit thermischen Analysen Informationen über die kristallographischen Eigenschaften der Hydratphasen. Die Proben wurden dabei bis zur Zerstörung der Hauptschicht und der damit verbundenen Amorphisierung aufgeheizt.

2.3.2. Infrarot- und Ramanspektroskopie

Mit Hilfe der Infrarot- und Ramanspektroskopie lassen sich Aussagen zur chemischen Bindung und Koordination erhalten. IR-Spektren wurden an einem BECKMAN Spektralphotometer 4220 im Wellenzahlbereich $4000 - 250 \text{ cm}^{-1}$ unter Verwendung der KBr- oder Nujoltechnik hergestellt. Die Ramanspektren wurden an einem Spektrometer CARY 82 aufgenommen; als Anregung diente die grüne Linie $514,5 \text{ nm}$ eines Argonlasers von SPECTRA PHYSICS. Als störend bei den Ramanuntersuchungen erwies sich die starke Fluoreszenz der Proben; im Fall des $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca} \{ \text{B}(\text{OH})_4 \}_2 \cdot 2\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 36\text{H}_2\text{O}$ verhinderte sie die Aufnahme eines Spektrums.

Hochaufgelöste IR-Spektren zeigten oft Aufspaltung von Schwingungsbanden und das Auftreten totalsymmetrischer Schwingungen. Dies weist auf Symmetrierniedrigung hin, verursacht eventuell durch Wasserstoffbrückenbindungen in der Struktur.

Aus der Zahl der Veröffentlichungen zur Schwingungsspektroskopie der Calciumaluminathydrate sollen hier genannt werden: BENSTED (s. Lit.-Verz.) zeigt die Anwendbarkeit von IR- und Ramanspektroskopie auf Klinkerminerale und Hydratphasen. HENNING (1966) und DANOWSKI (1966) befassen sich mit den Spektren von Erdalkalialuminathydrate. HOUTEPEN und STEIN (1976) berechnen ΔH -Werte für die Wasserstoffbrückenbindung an normalen und deuterierten Calciumaluminathydraten. VOLANT (1968) gibt die Spektren aller bekannten Calciumaluminathydrate und verwandten Verbindungen an.

Die Informationen über die Schwingungen von BO_3^- - und BO_4^- -Gruppen sind vor allem den Arbeiten von HARTERT und GLEMSER (1956), MOENKE (1962), WEIR et al. (1961 und 1964), VALYASSHKO und WLASSOVA (1969) und den Büchern von SIEBERT (1966) und FARMER (1974) entnommen.

2.3.3. Licht- und Rasterelektronenmikroskopie

Die röntgenographische Phasenanalyse wurde, wenn möglich, durch optische Untersuchungen ergänzt. In den Fällen, in denen ausreichend große Kristalle vorhanden waren, gelang es, wichtige Aussagen zur Symmetrie zu erhalten.

Das Rasterelektronenmikroskop liefert auch bei sehr geringen Kristallgrößen Informationen über Morphologie, Ausbildung und Phasenbestand.

Für die Untersuchungen standen LEITZ - Polarisationsmikroskope und ein REM CAMBRIDGE Stereoscan zur Verfügung.

2.3.4. Chemische Analyse

Die Zusammensetzung der Syntheseprodukte wurde durch die chemische Analyse überprüft. Um sicherzustellen, daß die Anionen quantitativ im Festkörper gebunden sind, wurden auch die Filtrate analysiert.

Zur Durchführung der Messungen standen zwei ZEISS - Spektralphotometer zur Verfügung :

ein FES M4QII zur Messung von CaO in Emission und zur colorimetrischen Bestimmung von B_2O_3 als Carminsäurekomplex (FRIES/GETROST) und eine AAS FMD3 zur Messung von Al_2O_3 und Fe_2O_3 in Absorption.

H_2O und CO_2 wurden gravimetrisch bestimmt; wo dies unsichere

Ergebnisse lieferte, wurde CO_2 zusätzlich mit der von SIMON (1984) gebauten gasvolumetrischen Apparatur gemessen. Die Chloridbestimmung erfolgte argentometrisch nach VOLHARD; Sulfat wurde nephelometrisch gemessen.

Die chemische Analyse konnte nur an einphasigen Bodenkörpern durchgeführt werden; in Systemen, in denen Begleitphasen auftreten, ist eine durch die chemische Analyse belegbare Aussage nicht möglich.

2.3.5. Thermoanalytische Untersuchungen

Bei den Bodenkörpern, die bis zu 60 Gew.% Wasser enthalten, sind durch die Thermoanalyse Informationen über die Bindung des Wassers als H_2O oder OH^- zu erwarten.

Für die Untersuchungen standen ein Steuergerät DUPONT 990 mit 1200°C DTA-Zelle, 550°C DSC-Zelle und 1200°C -Thermowaage zur Verfügung. Die Gewichtsverlustkurven wurden meist mit einer Heizrate von $0,5 - 2^\circ/\text{min}$ aufgenommen, um Vergleiche mit den durch Hochtemperaturröntgen gewonnenen Daten zu ermöglichen. Die differenzierten Kurven (DTG) resultieren aus Aufnahmen mit höheren Heizraten ($10^\circ/\text{min}$).

Wenn nicht anders angegeben, wurde in normaler Atmosphäre gearbeitet.

3. ERGEBNISSE

3.1. CALCIUMALUMINATHYDROXISALZE

3.1.1. LAMINARE VERBINDUNGEN

3.1.1.1. System $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot nH_2O - C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$

Die Bearbeitung des Systems TCAH - $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ ist grundlegend für das Verständnis des Einbaus von B_2O_3 in laminare Calciumaluminathydroxisalze. Ausschnittweise wurde das System von WENDA (1980) untersucht. Es zeigte sich, daß für die Endphasen Unmischbarkeit zu erwarten war.

TCAH liegt bei einer r.F. > 90% nach ARUJA (1961) in zwei Modifikationen vor: α_1 - und α_2 - C_4AH_{19} .

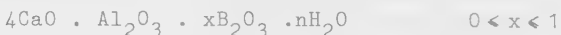
α_1 : a_0 : 5,77 Å und c_0 : 64,08 Å 6- Schichtstruktur

α_2 : a_0 : 5,77 Å und c_0 : 21,37 Å 2- Schichtstruktur

Der Basisabstand beider Modifikationen ist gleich und liegt bei 10,7 Å. Beim Trocknen auf 35% r.F. entwässert TCAH zu C_4AH_{13} mit einer hexagonalen 12- Schichtstruktur (FISCHER 1977) mit a_0 : 5,752 Å und c_0 : 95,27 Å.

Die Untersuchung des vollständigen Systems sollte die Zusammensetzung der laminaren borathaltigen Phase und ihr Stabilitätsgebiet erfassen.

Es wurden Synthesen folgender Zusammensetzung eingewogen:



Al_2O_3 wurde als $\alpha-Al(OH)_3$, B_2O_3 als H_3BO_3 eingebracht.

Nach einer Reaktionszeit von drei Monaten bei 20, 40 bzw. 50°C wurden die Bodenkörper filtriert und bei 100 bzw. 35 % r.F. untersucht.

Bem.: In den Gitterkonstantendiagrammen des Systems ist auf der Abszisse das Molverhältnis HBO_3^{2-}/Al_2O_3 aufgetragen.

3.1.1.1.1. Ergebnisse bei 20°C

Abb. 8 gibt anhand von c' die Phasenverhältnisse im System bei 20°C und 100 % r.F. wieder.

TCAH liegt als $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot 18H_2O \triangleq C_4AH_{19}$ vor und nimmt mit unveränderter Gitterkonstante $c' = 1066$ pm bei zunehmendem B_2O_3 - Gehalt stetig ab. Bedingt durch den Textureffekt der feuchten Proben kann für C_4AH_{19} nur c' angegeben werden. Monoborat $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ erscheint ab Molverhältnissen $HBO_3^{2-}/Al_2O_3 < 0,1$ und liegt bei $HBO_3^{2-}/Al_2O_3 = 1$ in reiner Form vor.

Bei höheren B_2O_3 - Konzentrationen existiert daneben ein Ettringit der Zusammensetzung $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$. Er wird in Abb. 8 und 10 durch $c_0/2$ repräsentiert.

Die Gitterkonstanten von $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ ändern sich im untersuchten Bereich nicht; die Symmetrie bleibt monoklin.

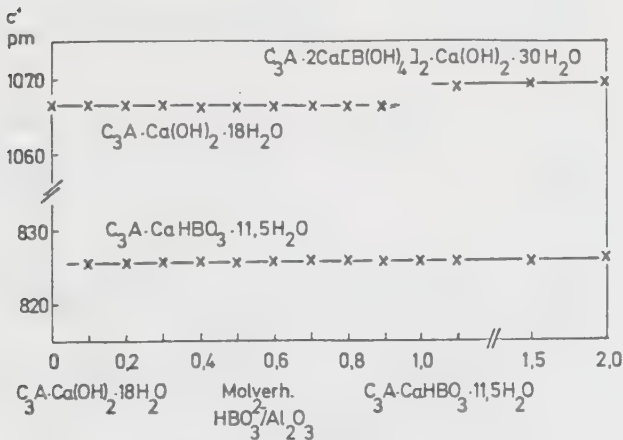


Abb. 8 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot 18H_2O - C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ bei 20°C und 100 % r.F.

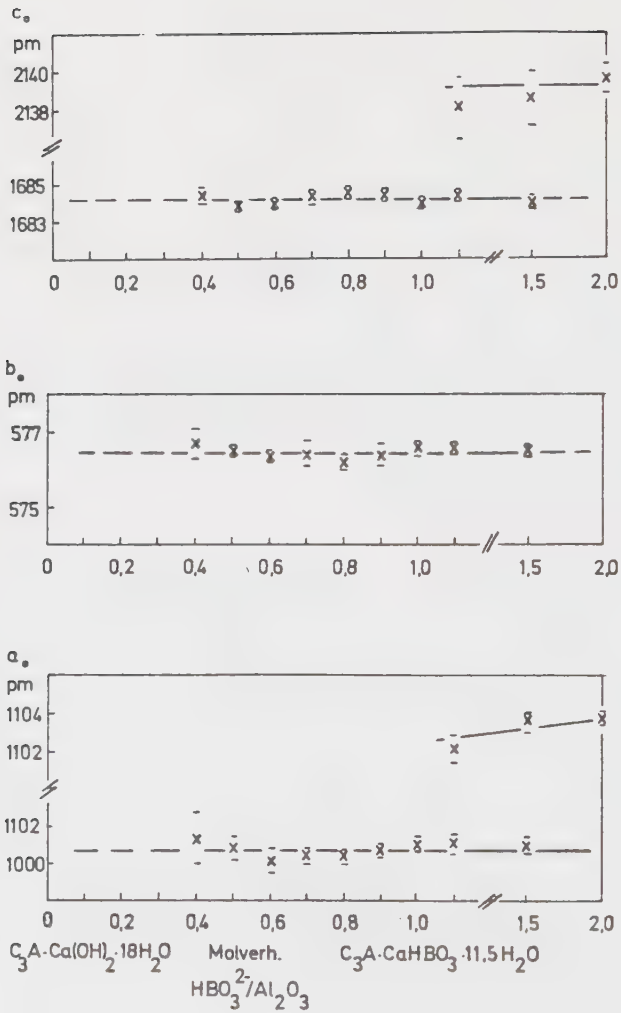


Abb. 9 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot 18H_2O - C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$
bei 20°C und 100 % r.F.

TCAH ist nicht angegeben

Bei 35 % r.F. liegt TCAH als C_4AH_{13} vor. Die Gitterkonstanten sind auf der Grundlage der von FISCHER (1977) und FISCHER und KUZEL (1982) vorgeschlagenen hexagonalen Zwölfschichtstruktur berechnet.

Auch $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ behält bei 35 % r. F. seine monoklinen Gitterkonstanten unverändert bei.

Im System TCAH - Monoborat wird damit bei $20^\circ C$ B_2O_3 bis zum Molverhältnis $HBO_3^{2-}/Al_2O_3 = 1$ in die laminare Phase $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ eingebaut.

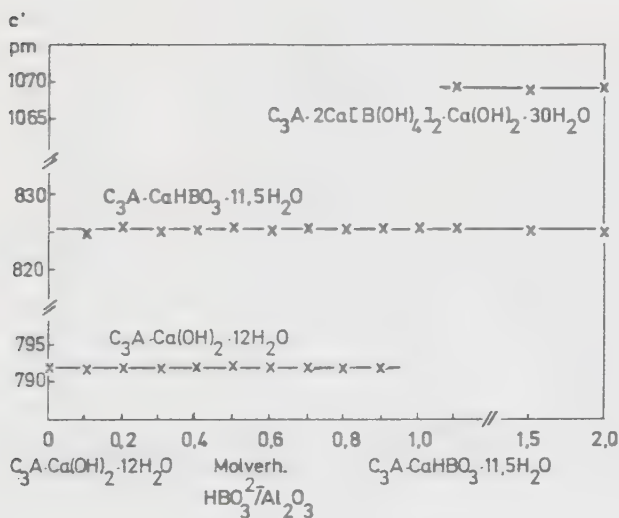


Abb. 10 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot 12H_2O$ - $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ bei $20^\circ C$ und 35 % r.F.

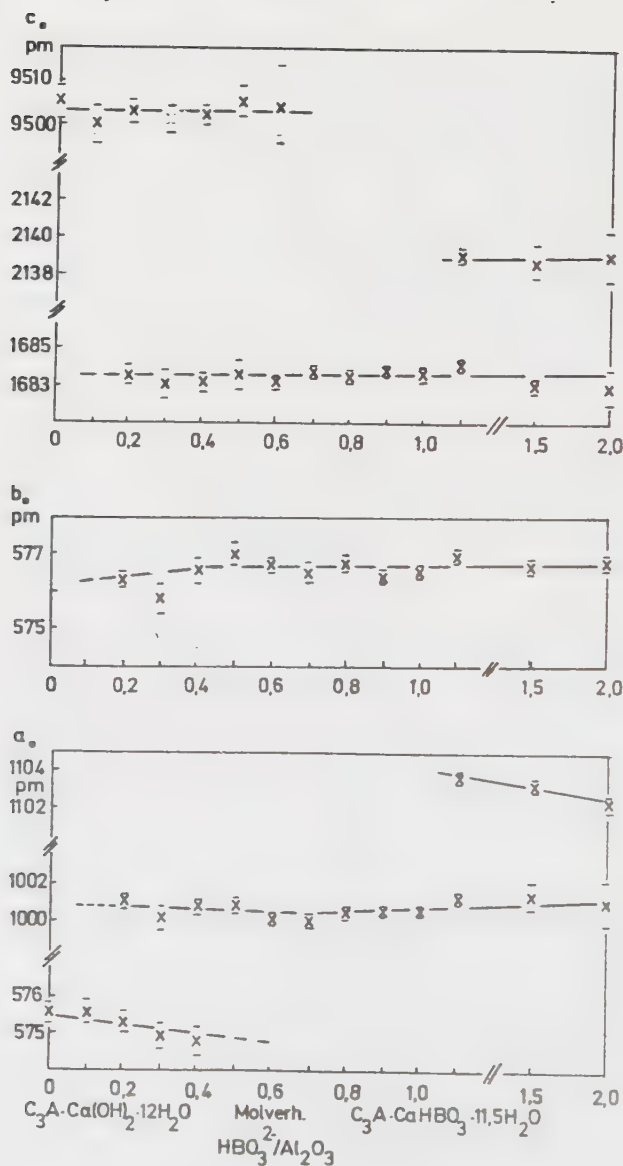


Abb. 11 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
 bei 20°C und 35 % r.F.

Die Abb. 8 - 11 zeigen, daß im System TCAH - Monoborat bei 20°C keine Mischbarkeit vorliegt. Ein Anionenaustausch OH^- gegen HBO_3^{2-} findet nicht statt.

Das Stabilitätsgebiet des laminaren $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ reicht, ausgedrückt im Molverhältnis $\text{HBO}_3^{2-}/\text{Al}_2\text{O}_3$, von > 0 bis 2; ab $\text{HBO}_3^{2-}/\text{Al}_2\text{O}_3 > 1$ wird B_2O_3 zunehmend in den Ettringit $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}(\text{B}(\text{OH})_4)_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$ eingebaut.

Zus.setzung der Einwaage Molverh. $\text{HBO}_3^{2-}/\text{Al}_2\text{O}_3 \quad \hat{=}$	$\text{B}_2\text{O}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$	% B_2O_3 in Lsg. bez. auf Einwaage B_2O_3
0.1	0.05	0.3
0.2	0.10	0.2
0.3	0.15	0.1
0.4	0.20	0.1
0.5	0.25	0.06
0.6	0.30	0.02
0.7	0.35	0.03
0.8	0.40	0.03
0.9	0.45	0.05
1.0	0.50	0.5
1.1	0.55	0.9
1.5	0.75	0.9
2.0	1.0	0.4

Tab. 2 : Löslichkeit des B_2O_3 im System TCAH - Monoborat bei 20°C

Der Grad der Fixierung des B_2O_3 im Festkörper ist größer als 99 %; im Filtrat finden sich nur unbedeutende Mengen B_2O_3 (Tab. 2).

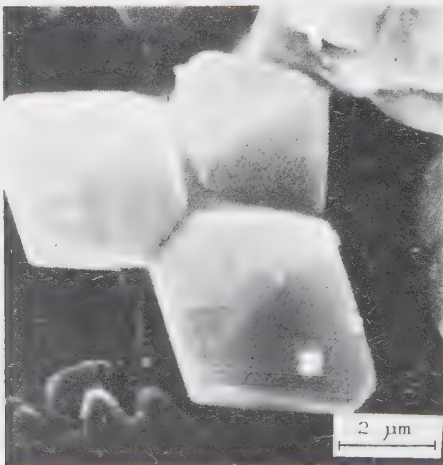
3.1.1.1.2. Ergebnisse bei 40°C

Bei Temperaturen $> 25^{\circ}\text{C}$ zerfällt TCAH in C_3AH_6 und CH . Ein Einbau von B_2O_3 in Form von $\text{B}(\text{OH})_4^-$ in C_3AH_6 erfolgt nicht. Einflüsse des Milieus auf die Tracht des C_3AH_6 sind allerdings zu erkennen (Bild 2 und 3): es werden bevorzugt die Formen $\{111\}$ und $\{100\}$ ausgebildet. PÜLLMANN (1984) berichtet von weiteren Trachten des C_3AH_6 in Abhängigkeit vom Lösungsmilieu.



Bild 2 und 3 :
 C_3AH_6 im System
TCAH - Monoborat
bei 40°C

Tracht : $\{111\}$ und
 $\{100\}$



Die Existenzgebiete und Gitterkonstanten von $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ und $C_3A \cdot 2Ca[B(OH)_4]_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ bei $40^\circ C$ gleichen denen bei $20^\circ C$. Die geringe Änderung in a_0 bei geringen B_2O_3 - Gehalten ist möglicherweise auf Carbonatisierung während der Reaktionszeit zurückzuführen. C_3AH_6 und CH sind als Zerfallsprodukte des C_4AH_n nicht mit eingetragen.

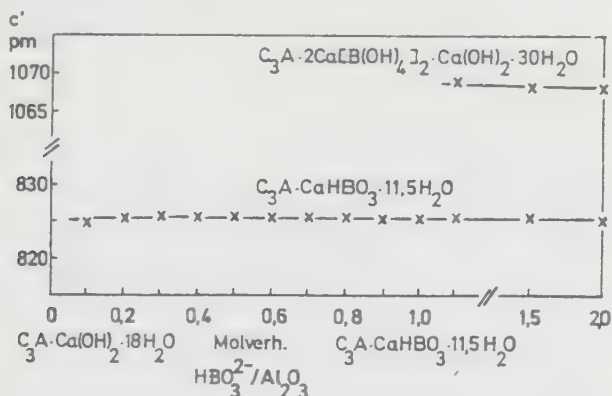


Abb. 12 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot nH_2O - C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ bei $40^\circ C$ und 100 % r.F.

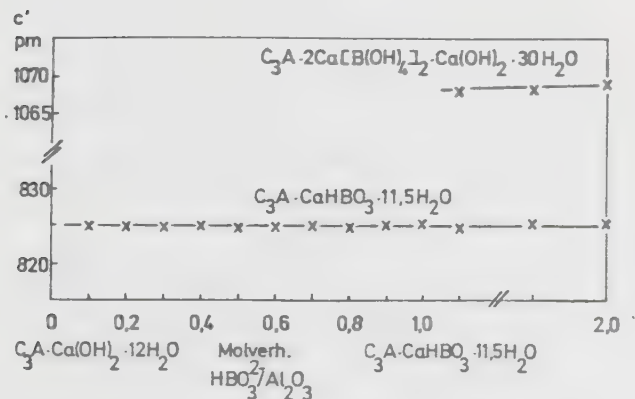


Abb. 13 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot nH_2O - C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ bei $40^\circ C$ und 35 % r.F.

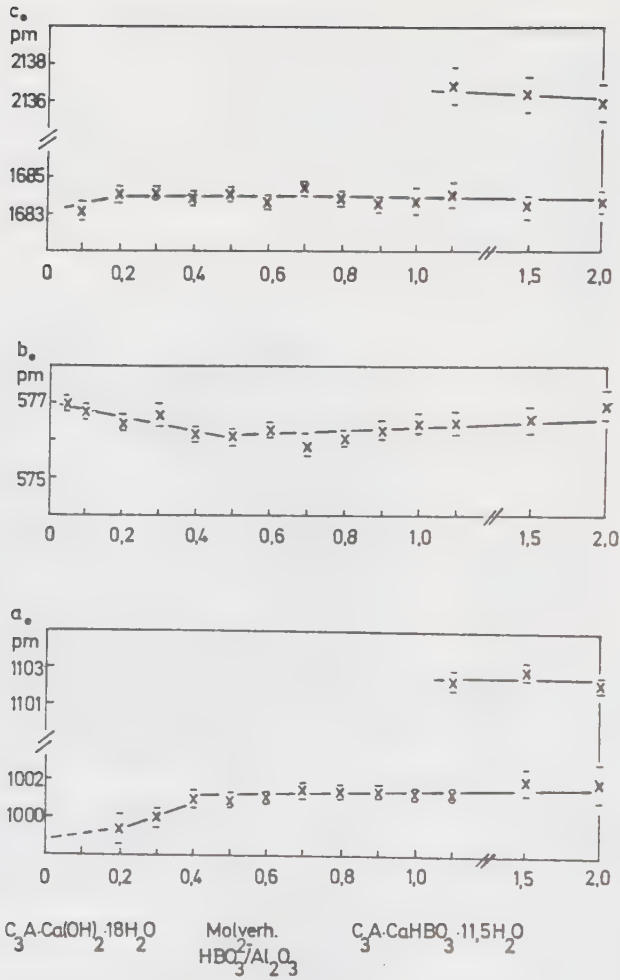


Abb. 14 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot nH_2O - C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$
 bei 40°C und 100 % r.F.

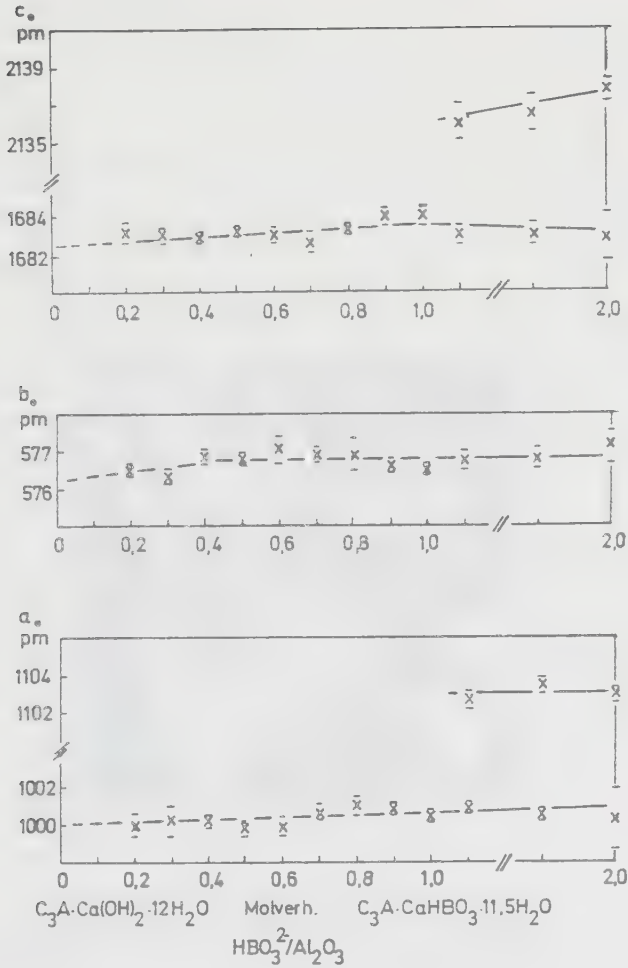


Abb. 15 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11.5\text{H}_2\text{O}$ bei 40°C und 35 % r.F.

Die gemessenen Löslichkeiten für B_2O_3 liegen bei $40^\circ C$ etwa doppelt so hoch wie bei $20^\circ C$: ca. 1,5 - 2 % des eingewogenen B_2O_3 befinden sich in Lösung.

Die höhere Reaktionstemperatur beeinflusst das Größenzwachstum der Kristalle günstig (Bild 4).

Ein Austausch $OH^- \longleftrightarrow HBO_3^{2-}$ findet wie bei $20^\circ C$ nicht statt.



Bild 4 : Monoborat $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ bei $40^\circ C$ gezüchtet
REM - Aufnahme

3.1.1.1.3. Ergebnisse bei 50°C

Das System TCAH - Monoborat wurde bei 50°C nur im interessierenden Bereich von $\text{HBO}_3^{2-}/\text{Al}_2\text{O}_3 = 0,5$ bis 1,5 untersucht.

In wässriger Lösung entsteht bei Temperaturen ab 45°C kein Boratettringit mehr; neben dem weiterhin stabilen $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ erscheinen bei hohen B_2O_3 - Gehalten Reflexe von nicht identifizierten Phasen, bei denen es sich um Calciumborate handeln dürfte.

Die Konzentration des gelösten B_2O_3 erhöht sich ab dem Molverhältnis $\text{HBO}_3^{2-}/\text{Al}_2\text{O}_3 > 1$ deutlich; bis 10 % B_2O_3 , bezogen auf die Einwaage, können in Lösung sein.

Die Gitterparameter des $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ steigen etwas an. Eine Erklärung liegt möglicherweise in einer gewissen Phasenbreite bezüglich des Borgehaltes bei dieser Temperatur.

Bei $\text{HBO}_3^{2-}/\text{Al}_2\text{O}_3 > 1$ finden sich, bedingt durch die höhere Löslichkeit des B_2O_3 , relativ größere Mengen an C_3AH_6 und CH als bei 20 und 40°C. Aus Gründen der Übersicht sind in den folgenden Abbildungen nur die Werte von Monoborat eingetragen.

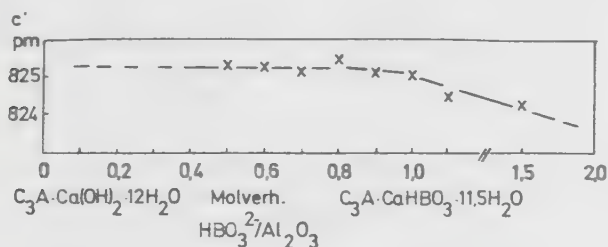


Abb. 16 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ bei 50°C und 35 % r.F.

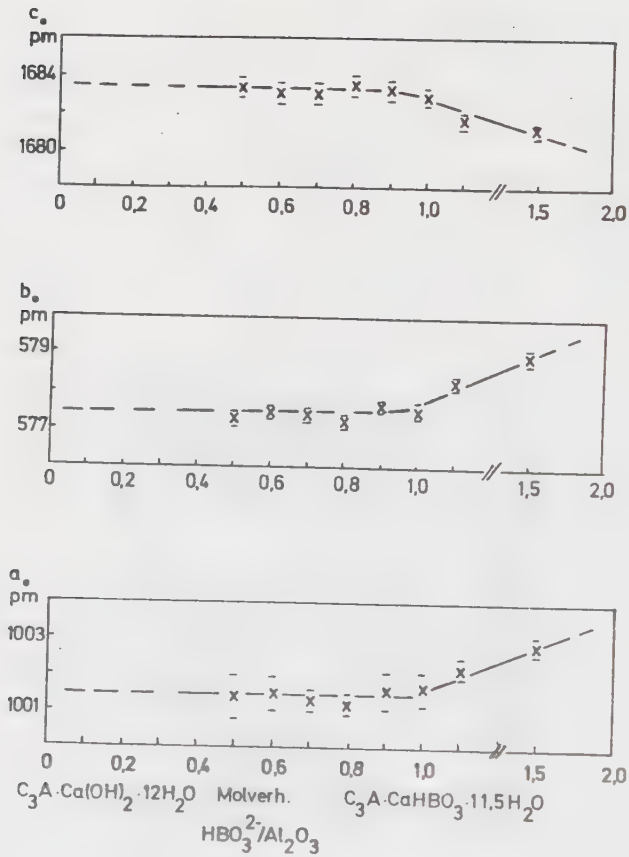


Abb. 17 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
 bei 50°C und 35 % r.F.

Abb. 18 faßt die Untersuchungsergebnisse des Systems $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot nH_2O - C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ bei 20, 40 und 50°C zusammen. Alle Phasen des Bodenkörpers sind berücksichtigt.

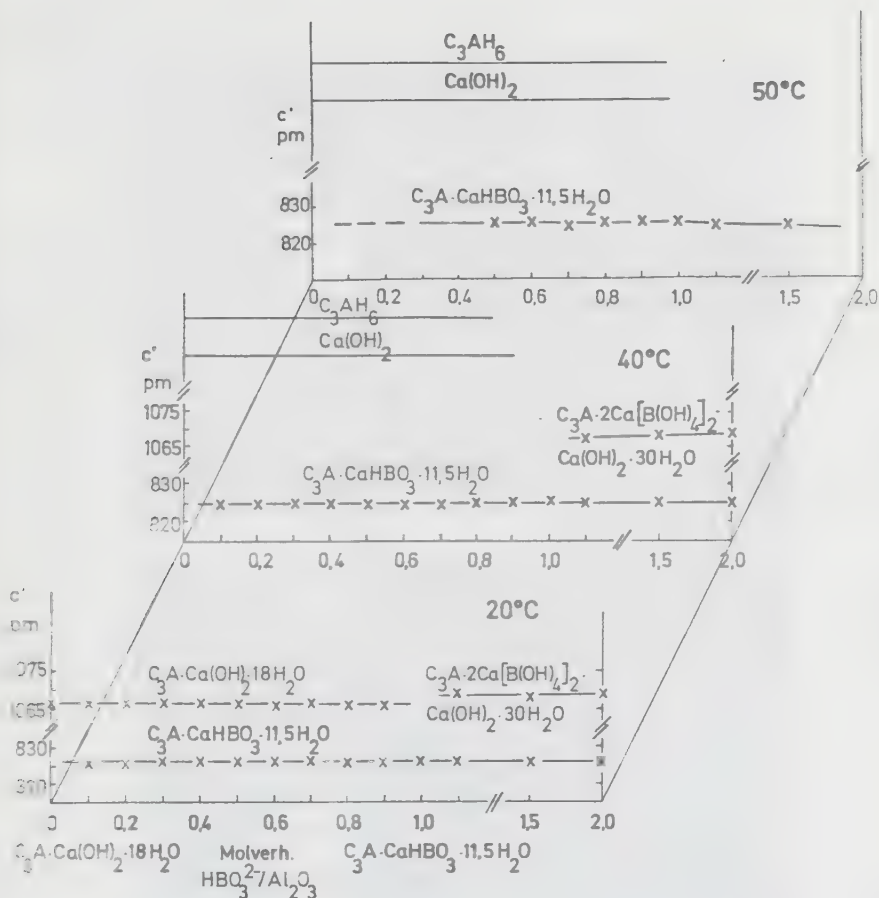


Abb. 18 : Schichtdicken der Bodenkörper im System $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot nH_2O - C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ bei 20, 40 und 50°C und 100 % r.H.

3.1.1.1.4. Untersuchung von $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$ "Monoborat"

Die Größe der nach dreimonatiger Reaktionszeit erhaltenen Kristalle reichte für Einkristallaufnahmen nicht aus. Einige der Synthesen wurden deshalb länger als 12 Monate bei $40^\circ C$ belassen. Al_2O_3 wurde in Form von Bayerit verwendet; mit $CaO.Al_2O_3$ angesetzte Versuche ergaben zu kleine Kristalle. Hydrothermale Züchtungsversuche schlugen bis jetzt fehl. Die Größe der schließlich erhaltenen Kristalle lag bei 0,2 bis 0,3 mm Durchmesser.

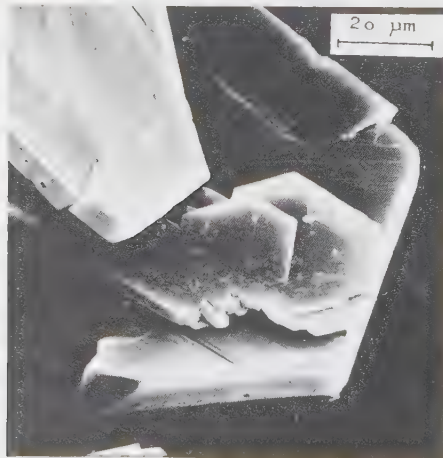
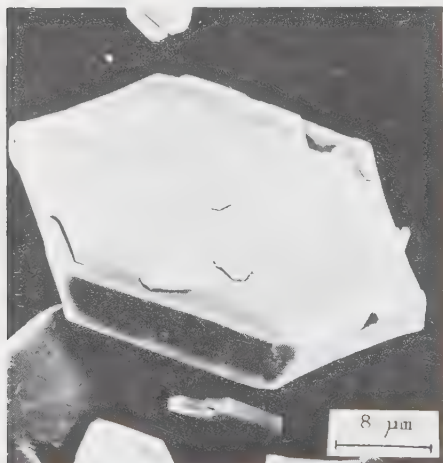


Bild 5 und 6 :
Kristalle von
 $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$
REM - Aufnahmen

Unter dem Polarisationsmikroskop erweisen sich die Kristalle als optisch nicht homogen: sie sind bei gekreuzten Polarisatoren in sechs Sektoren geteilt. Deren Grenzen stehen senkrecht auf den Kanten der Basisflächen und treffen sich in der Mitte (Bild 7 und 8).

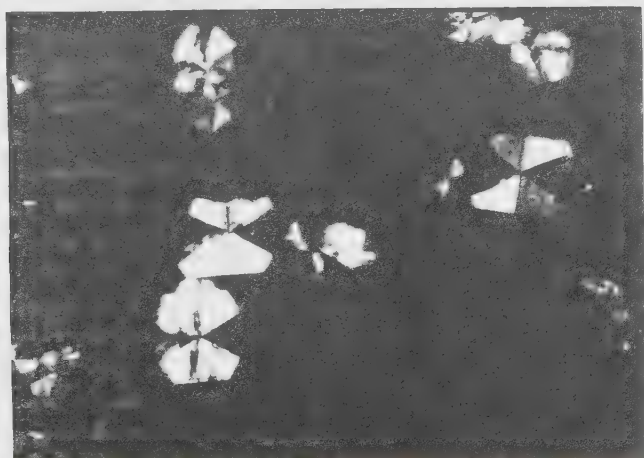
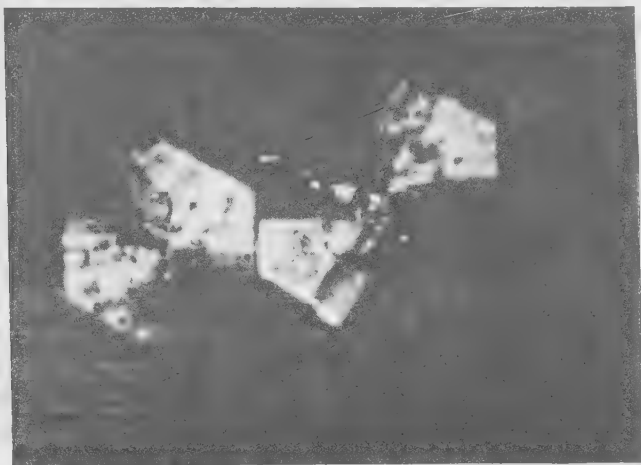


Bild 7 und 8 : Kristalle von $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$
Polarisationsmikroskop; Polarisatoren gekreuzt

Je zwei gegenüberliegende Felder löschen gleich aus. Von einigen wenigen Kristallen gelangen konoskopische Aufnahmen der einzelnen Sektoren; sie erwiesen sich als optisch zweiachsig (Bild 9).

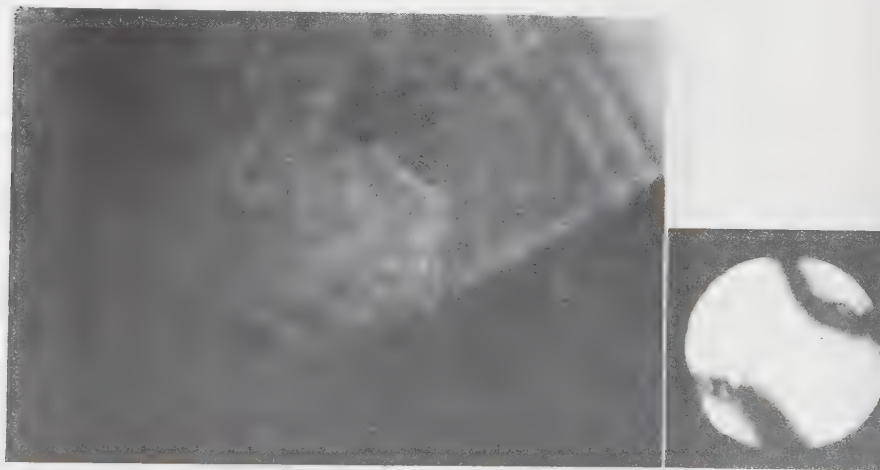


Bild 9 : Sektor eines Kristalls von $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5 H_2O$
Polarisationsmikroskop; gekreuzte Polarisatoren;
daneben Achsenbild des Sektors

Erhitzt man bei normaler Luftfeuchte $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5 H_2O$ im Heizmikroskop, verschwindet bei $60^\circ C$ die Felderteilung innerhalb von Sekunden; die Kristalle werden irreversibel optisch einachsig (Bild 10), ohne daß nachfolgende Röntgenaufnahmen eine Änderung des Schichtabstandes c' anzeigen. Beim Erwärmen der Kristalle in Wasser bleiben die Sektoren bei Temperaturen von $100^\circ C$ bis zu acht Stunden erhalten. Danach zerfällt $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5 H_2O$ allmählich zu stäbchenförmigen Kristallen von $2CaO \cdot B_2O_3 \cdot H_2O$ (SCHÄFER 1968). Wie thermische und röntgenographische Untersuchungen (Abb. 19 - 21) zeigen, wird das H_2O der Zwischenschicht reversibel in mehreren Schritten abgegeben.

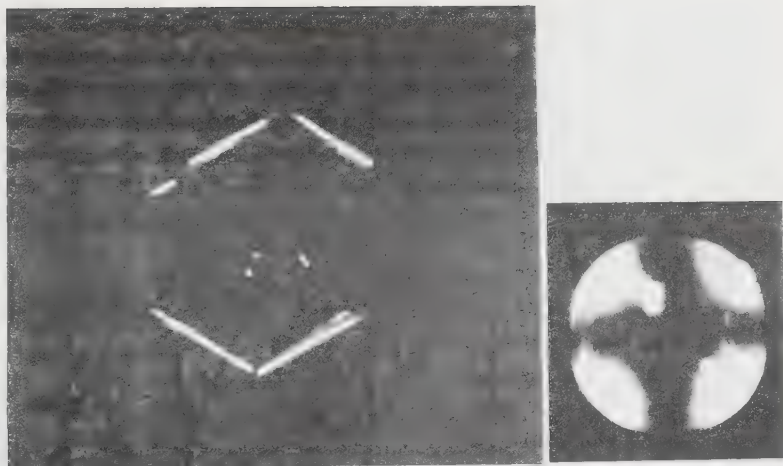


Bild 10 : Kristall von $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$, umgewandelt;
Polarisationsmikroskop, gekreuzte Polarisatoren
daneben Achsenbild

Die Doppelstufe, die der Dehydratation zum $C_3A.CaHBO_3.10,5H_2O$
bzw. $C_3A.CaHBO_3.9,5H_2O$ entspricht, kann in Aufnahmen unter
selbsterzeugter Atmosphäre aufgelöst werden (Abb. 19).

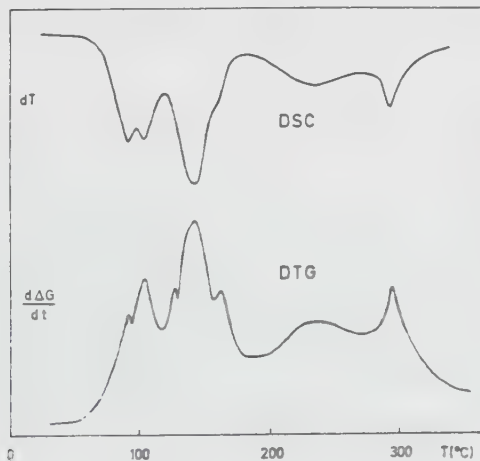


Abb. 19 :
DSC und DTG von
 $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$
selbsterzeugte
Atmosphäre;
R : $10^0/min$

Bei Aufnahmen unter normaler Atmosphäre gelingt diese Differenzierung nicht (Abb. 20). Der nachfolgende größere Peak ist der vollständigen Entwässerung der Zwischenschicht zuzuordnen. Die Dehydratation der Hauptschicht verläuft ähnlich wie bei anderen Calciumaluminathydraten.

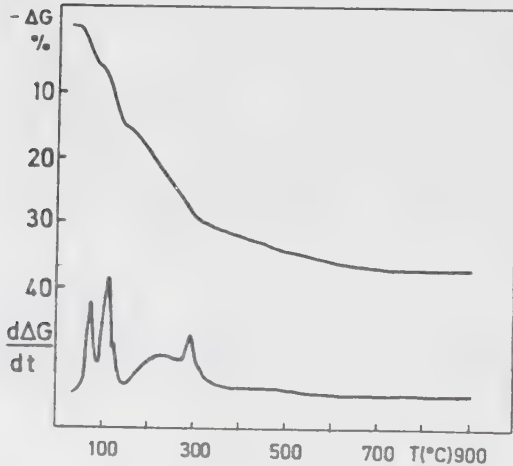


Abb. 20 :
TG- Aufnahme von
 $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$
Atmosphäre : Luft
R : $1^{\circ}/min$ (TG)
 $10^{\circ}/min$ (DTG)

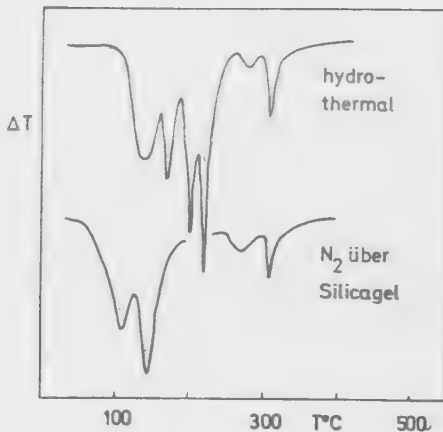


Abb. 21 :
DSC- Aufnahmen von
 $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$
unter verschiedenen
rel. Feuchten

Abb. 21 zeigt die Abhängigkeit der Dehydratation vom H_2O - Partialdruck.

Das Ergebnis der Entwässerung in der Röntgenheizkammer ist in Abb. 22 enthalten. Angegeben ist die jeweilige Zusammensetzung der Zwischenschicht von $(Ca_4\{Al(OH)_6\}_2)(HBO_3 \cdot 5,5H_2O)$. Tab. 3 faßt die Resultate der thermischen und röntgenographischen Untersuchungen zusammen.

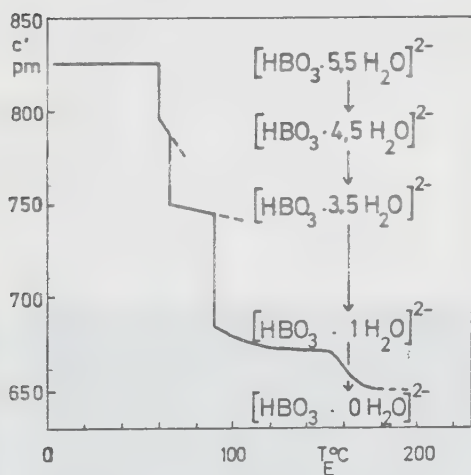


Abb. 22 :
Entwässerung von
 $C_3A.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$
in der Röntgen-
heizkammer

T °C	Gew.verlust%	Rest H_2O ges.	Zwischenschicht	c' pm
20	0	12	$HBO_3 \cdot 5,5H_2O$	825
60	3,1	11	$HBO_3 \cdot 4,5H_2O$	785
65	6,0	10	$HBO_3 \cdot 3,5H_2O$	750
90	13,9	7 - 8	$HBO_3 \cdot 1-2H_2O$	670
160		6	HBO_3	650
ab 200		Entwässerung der Hauptschicht		röntgen-
300	31			amorph
1000	36,9	0		

Tab. 3 : Entwässerung von $C_3A.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O \triangleq C_4A.1/2B_2O_3 \cdot 12H_2O$

Die Meßergebnisse lassen den Schluß zu, daß die beobachtete Phasenumwandlung allochemisch unter H_2O - Abgabe verläuft; es liegt nahe, daß dabei kurzzeitig das sehr instabile $C_3A.CaHBO_3.10,5H_2O$ gebildet wird. Da die im Anschluß an die Phasenumwandlung aufgenommenen Röntgendiagramme keine Änderung des Schichtabstandes c' anzeigen, muß eine sofortige Rehydratation zum $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$ angenommen werden. Die Reflexaufspaltungen, die vor der Phasenumwandlung auf hochaufgelösten Pulverdiagrammen und Guinieraufnahmen zu erkennen waren, sind danach verschwunden; auf der Grundlage einer Sechsschichtstruktur ist dann eine widerspruchsfreie rhomboedrische Indizierung möglich (Bild 11). Es ist daher anzunehmen, daß Monoborat vor der Phasenumwandlung einer Untergruppe von R 3c oder R $\bar{3}c$ zuzuordnen ist, d.h. monokline oder triklone Symmetrie besitzt. Indizierungen in Analogie zum monoklinen $C_3A.CaCl_2.10H_2O$ sind erfolgreich. Danach kommen die Raumgruppen Cc oder C 2/c in Betracht.

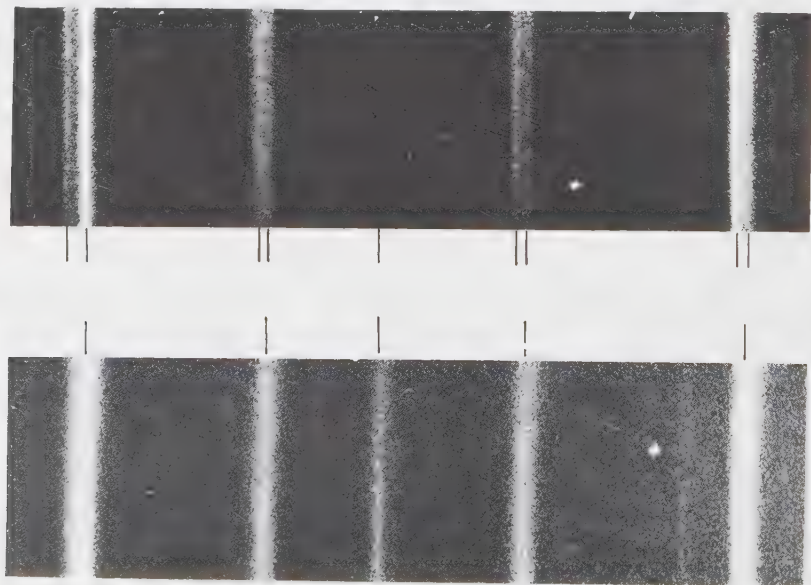


Bild 11 : Guinieraufnahmen von $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$
vor (oben) und nach (unten) der Phasenumwandlung

Abb. 23 zeigt die engen Beziehungen zwischen der rhomboedrischen Sechsschicht- und der monoklinen Zweischichtstruktur; ein Übergang von der einen in die andere Struktur ist nur mit einer geringen Verschiebung der Schichtebenen verbunden.

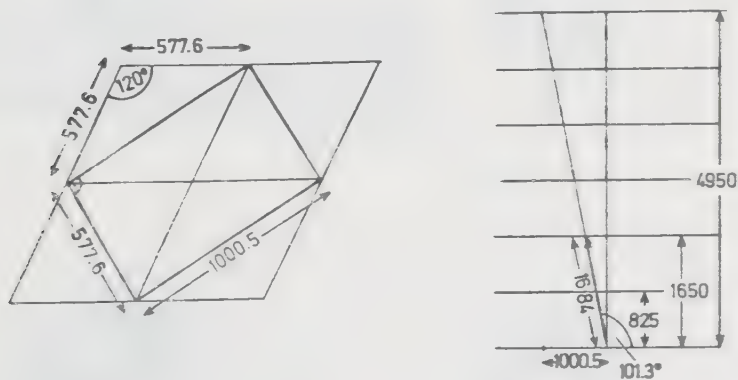


Abb. 23 : Beziehungen zwischen der rhomboedrischen Sechsschicht- und der monoklinen Zweischichtstruktur des $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$

Mit Einkristallaufnahmen sollte versucht werden, die Unterschiede zwischen der monoklinen und der rhomboedrischen Phase direkt sichtbar zu machen; die reziproken Gitter erwiesen sich jedoch als fast identisch. Lediglich durch die thermische Beanspruchung waren die Reflexe des rhomboedrischen Kristalls etwas verschmiert.

In Bild 12 sind die Precessionaufnahmen eines monoklinen und eines rhomboedrischen Kristalls einander gegenübergestellt. Um den direkten Vergleich zu ermöglichen, ist die Orientierung in beiden Fällen gleich gewählt. Bezogen auf die monokline Aufstellung, sind die reziproken Gitterebenen b^*a^* und b^*c^* und das reziproke Gitter in der Plättchenenebene abgebildet.

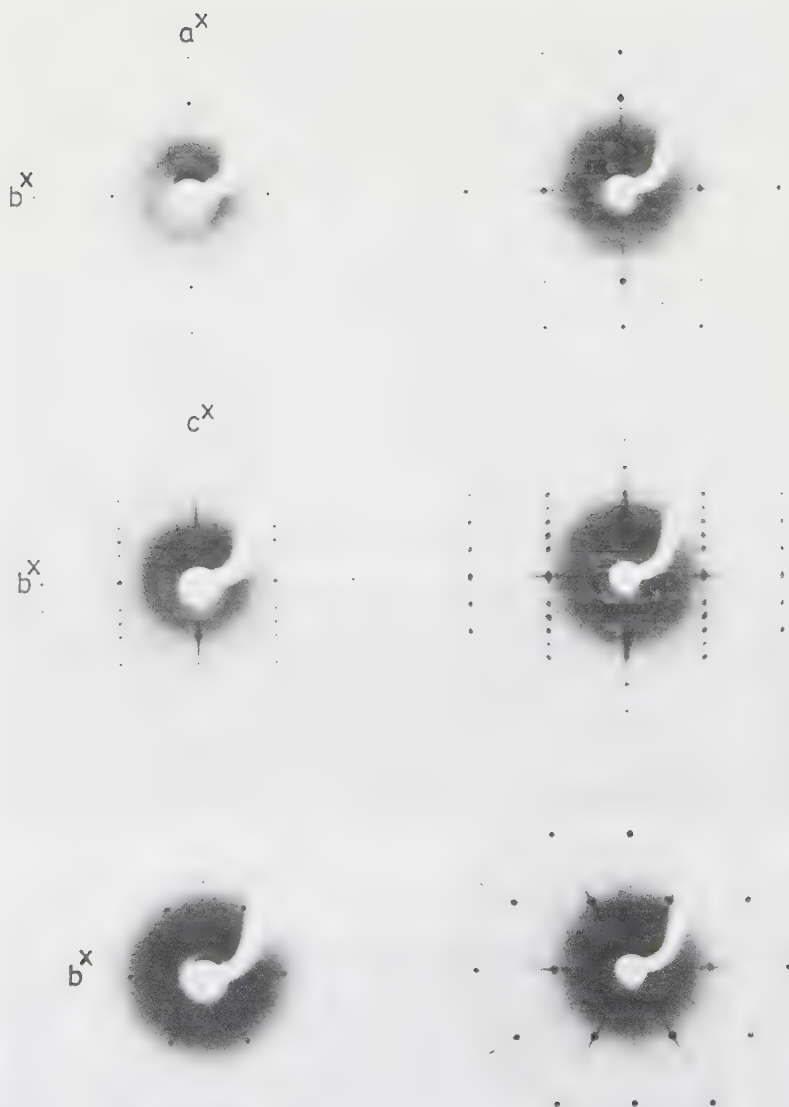


Bild 12 : Precessionaufnahmen des monoklinen (links) und
des rhomboedrischen Kristalls (rechts)
Strahlung: $\text{Mo K}_{\alpha 1}$; außer Aufnahme links unten
Plättchenebene monokliner Kristall

Abb. 13:
Verbreiterung-Aufnahme
des Ramanlinen
des $\text{Ca}_3\text{Al}_2(\text{OH})_6 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
(Belichtungszeit :
drei Wochen)
Reflexe h11

Die IR - Spektren unterscheiden sich von denen anderer Calciumaluminathydrate durch das Auftreten der ν_3 - BO_3 - Schwingung und der B-OH - Banden. ν_3 - BO_3 besitzt neben dem Maximum bei 1420 cm^{-1} eine deutliche Schulter bei 1475 cm^{-1} , die nach der Phasenumwandlung kaum mehr sichtbar ist. Das Auftreten einer Bandenaufspaltung bedeutet, daß die Symmetrie der BO_3 - Gruppe kleiner sein muß als D_{3h} . Da aus Gründen des Ladungserhalts mit einer HBO_3^{2-} - Gruppe gerechnet werden muß, kann deren Symmetrie höchstens C_s oder C_1 sein. Auch die bei $1150 - 1180 \text{ cm}^{-1}$ auftretenden B-OH-Schwingungen deuten auf die Existenz von Wasserstoffbrücken hin.

Im Ramanspektrum erscheinen neben den Schwingungen des AlO_6 die ν_1 - BO_3 - und die ν_3 - BO_3 -Bande. Die schwingungsspektroskopischen Ergebnisse sind in Abb. 24 und Tab. 4 zusammengestellt.

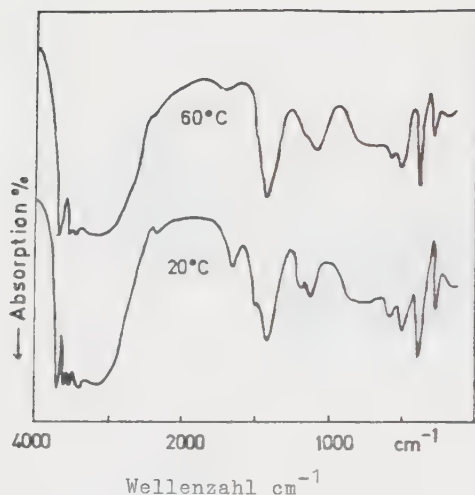


Abb. 24 :
IR - Spektren von
 $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$
vor und nach der
Phasenumwandlung

IR (20°C)	IR (60°C)	Raman	Zuordnung
3715	3715		OH (Hauptschicht)
3620	3620		OH "
3575	3575		H_2O ν_1/ν_3 (Zwischen-
3500-2800	3500-2800		H_2O ν_1/ν_2 schicht)
1650	1650		H_2O ν_2
1475			BO_3 ν_3
1420	1420	1420	BO_3 ν_3
1180	1180-1150		B-OH
1150			B-OH
		890	BO_3 ν_1
780-700	750		$Al(OH)_6$
580	580		AlO_6
530	530		AlO_6
425	425		Ca-O
295	295		Ca-O

Tab. 4 : IR - und Raman-Frequenzen von $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$

Nach der chemischen Analyse (Tab. 5) und der gemessenen Dichte von $2,03 \text{ g/cm}^{-3}$ enthält die monokline Zelle 2, die rhomboedrische 3 Formeleinheiten $\text{C}_4\text{A} \cdot 1/2\text{B}_2\text{O}_3 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$.

In Analogie zu anderen Calciumaluminathydraten läßt sich die Strukturformel ableiten :



	gem.	ber.
CaO	38,8 %	38,9 %
Al_2O_3	17,3 %	17,7 %
B_2O_3	6,1 %	6,0 %
H_2O	36,7 %	37,4 %
	99,0 %	100,0 %

Tab. 5 : chemische Analyse von $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

Die Klärung der Frage, worauf die optische Sektorenbildung der Kristalle zurückzuführen ist, ist erst nach einer Strukturbestimmung zu erwarten. Vorläufig bleibt nur die Vermutung, daß es sich um Durchdringungsdrillinge oder eine Verspannung der Struktur handeln könnte, in Analogie zu Jeremjewit (HERTING/STRUNZ 1978, FOORD et al. 1981).

3.1.1.2. System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$

Das kristallchemische Verhalten von $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$ gegenüber anderen Calciumaluminathydraten wurde bereits von mehreren Autoren beschrieben. KUZEL (1966 und 1971) findet im System $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O - C_3A \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$ eine intermediäre Verbindung mit Überstruktur. ROBERTS (1968) und PÖLLMANN (1984) beschreiben im System TCAH - Monosulfat teilweise Mischbarkeit, während im System $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O - C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ Unmischbarkeit vorliegt (PÖLLMANN 1984). Zur Untersuchung des Systems $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$ wurden Synthesen folgender Zusammensetzung eingewogen:

$$4CaO \cdot Al_2O_3 \cdot (1-x)/2 B_2O_3 \cdot x SO_3 \cdot nH_2O \quad 0 \leq x \leq 1$$

B_2O_3 wurde als H_3BO_3 , SO_3 als $CaSO_4 \cdot 2H_2O$ und Al_2O_3 als $\alpha-Al(OH)_3$ oder $CaO \cdot Al_2O_3$ zugegeben. Nach dreimonatiger Reaktionszeit wurden die Syntheseprodukte abfiltriert und untersucht.

Bem.: Wegen zahlreicher Koinzidenzen der Röntgenreflexe von $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ und $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$ konnten die monoklinen Gitterkonstanten von Monoborat nicht über den gesamten Existenzbereich der Verbindung berechnet werden. Durch die starken Basisreflexe lassen sich die Verbindungen aber ausreichend charakterisieren.

3.1.1.2.1. Ergebnisse bei 20°C

Die Abb. 25 und 26 geben anhand von c' die Phasenverhältnisse im System bei 20°C und 100 bzw. 35 % r.F. wieder. $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ ist mit gleichbleibenden Gitterkonstanten bis 83 Mol% Monosulfat stabil. Ein Einbau von SO_4^{2-} in Monoborat erfolgt damit nicht.

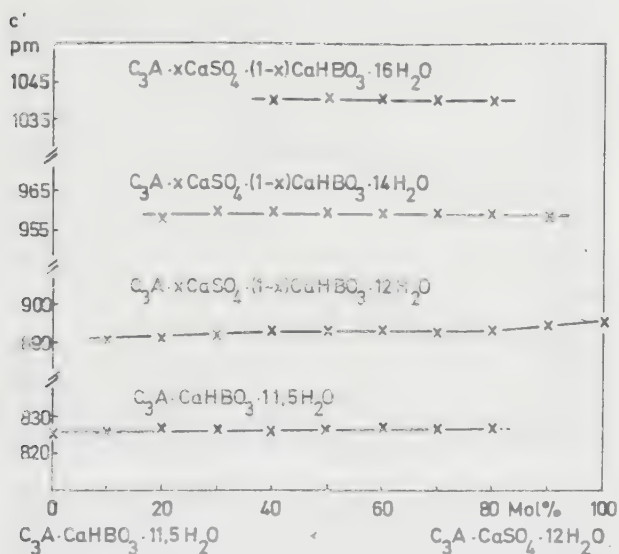


Abb. 25 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaSO_4 \cdot nH_2O$ bei $20^\circ C$ und 100 % r.F.

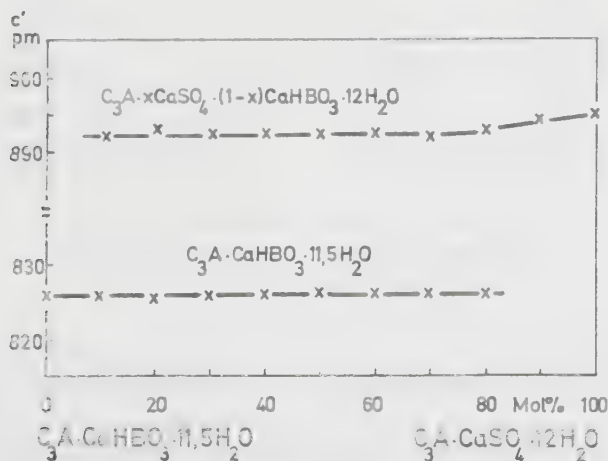


Abb. 26 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$ bei $20^\circ C$ und 100 % r.F.

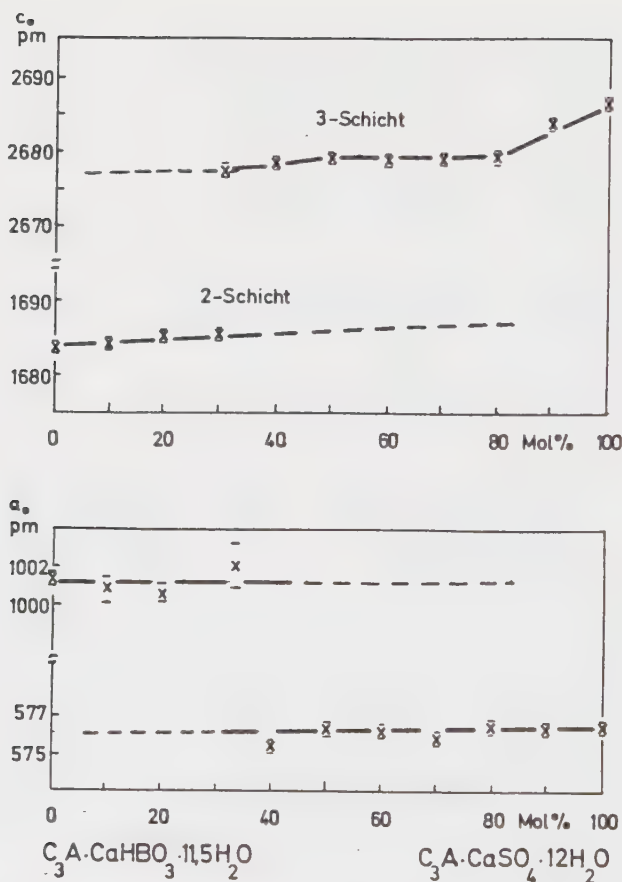


Abb. 27 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$
 bei $20^\circ C$ und 100 % r.F.

Die Gitterkonstanten des $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$ bleiben von 5 bis 80 Mol % Monosulfat praktisch unverändert; darüber steigen c' und c_0 deutlich an. Da sich weniger als 1 % des eingewogenen B_2O_3 in Lösung befinden, folgt, daß B_2O_3 ab 83 Mol % Monosulfat im $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot nH_2O$ gebunden wird.

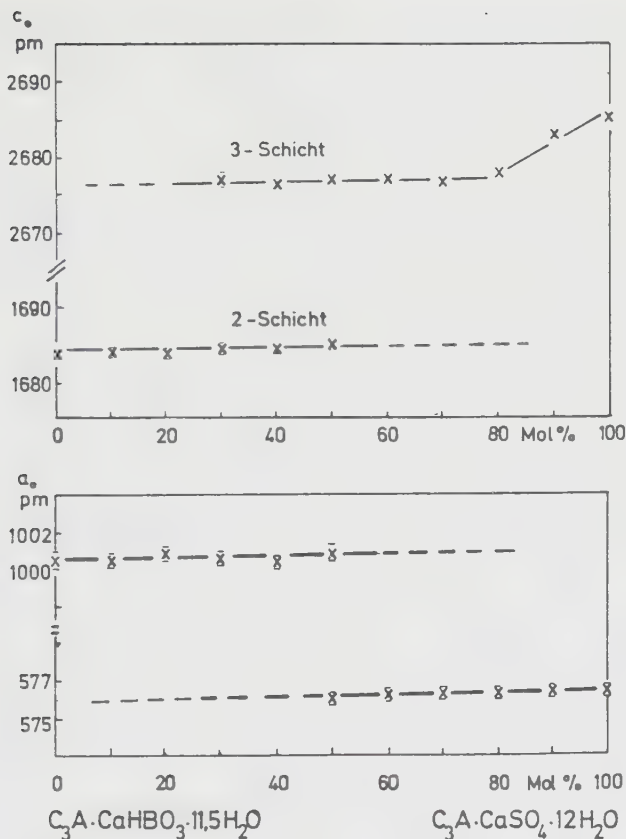


Abb. 28 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$
 bei 20°C und 35 % r.F.

Auswirkungen des HBO_3^{2-} - Einbaues auf die Gitterkonstante a_0 sind nicht zu erkennen.

Die Zusammensetzung des borathaltigen Monosulfats kann angegeben werden mit

$$C_3A \cdot xCaSO_4 \cdot (1-x)CaHBO_3 \cdot 12H_2O \quad 0,83 \leq x \leq 1$$

Im sulfatreichen Teil des Systems ändert sich die Zusammensetzung des Mischkristalls entsprechend der angegebenen Formel bis zu einem Grenzmischkristall

$C_3A \cdot 0,83CaSO_4 \cdot 0,17CaHBO_3 \cdot 12H_2O$, der bis zu Sulfatgehalten von 5 Mol % Monosulfat stabil bleibt.

Neben dem bisher aufgezeigten 12-Hydrat des Grenzmischkristalls liegen bei 100 % r.F. zwei höhere Hydratstufen vor, das 14- und das 16-Hydrat (vgl. Abb. 25). Da von ihnen meist nur 001 - Reflexe zu erkennen sind, ist lediglich die Schichtdicke c' angegeben.

Unter Berücksichtigung thermodynamischer Grundsätze bedeutet die Existenz der beiden höheren Hydratstufen, daß das 16-Hydrat im Kontakt mit der Mutterlauge vorgelegen haben muß und die niedrigeren Hydratstufen durch Dehydratation, eventuell bei der Präparation, entstanden sind. Reines Monosulfat bildet die höheren Hydratstufen nur unter speziellen Bedingungen aus (KUZEL 1969, DOSCH 1967).

Es muß daher angenommen werden, daß der Einbau von HBO_3^{2-} in Monosulfat für die Bildung der wasserreichen Hydrate verantwortlich ist.

Nach der Trocknung auf 35 % r.F. liegt auch der Mischkristall als 12-Hydrat vor.

Der Austausch der Anionen in der Zwischenschicht des Monosulfats läßt sich formulieren:



Die Zwischenschicht von $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ bleibt bei 20°C unverändert.

3.1.1.2.2. Ergebnisse bei 40°C

Wie in Abb. 29 und 30 wiedergegeben ist, kann der sulfatreiche Mischkristall bis <10 Mol % Monosulfat nachgewiesen werden; andererseits nehmen die Gitterkonstanten

von $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ bis 20 Mol % Monosulfat leicht zu
 und bleiben dann konstant. Die Möglichkeit eines SO_4^{2-} -
 Einbaus in Monoborat kann damit nicht ausgeschlossen werden.

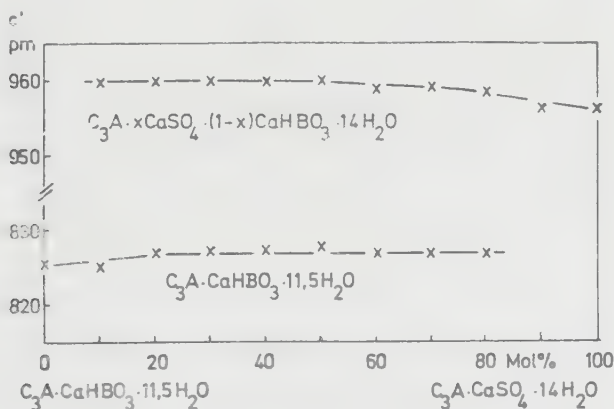


Abb. 29 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaSO_4 \cdot nH_2O$
 bei $40^\circ C$ und 100 % r.F.

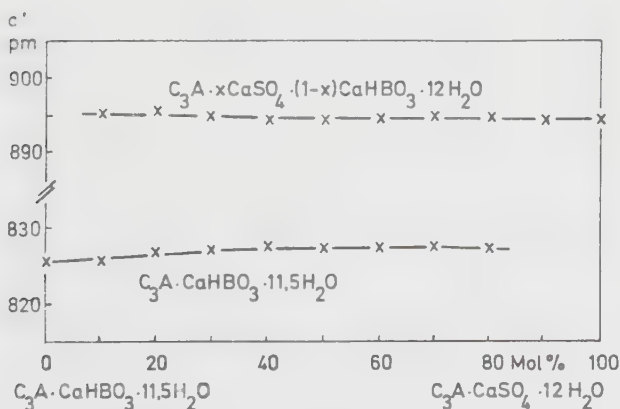


Abb. 30 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$
 bei $40^\circ C$ und 35 % r.F.

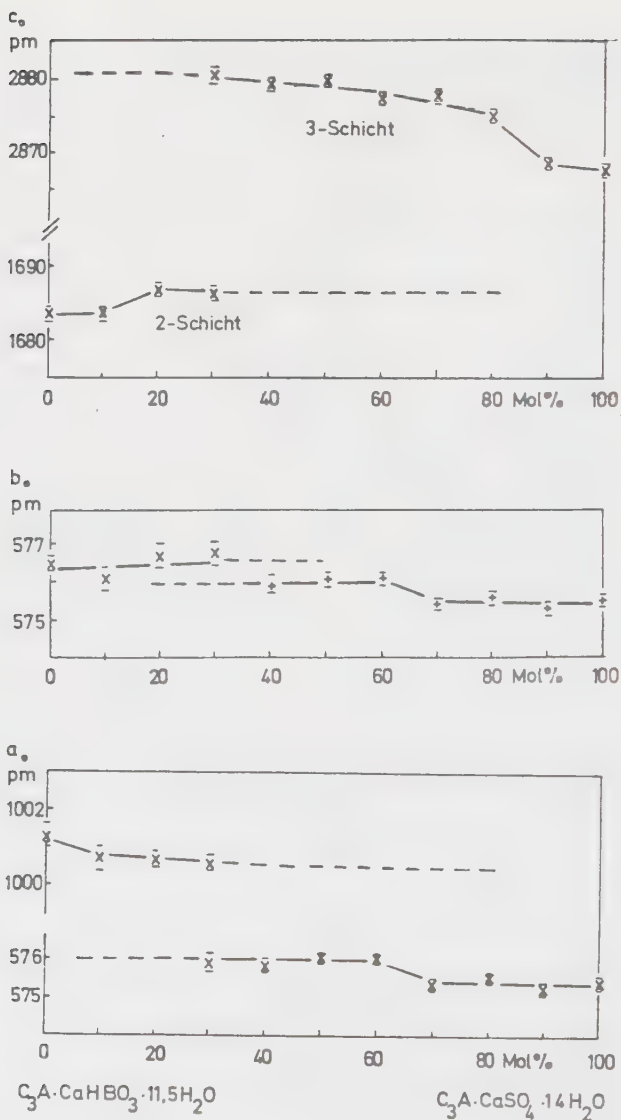


Abb. 31 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 14H_2O$ bei $40^\circ C$ und 100 % r.F.

$b_0 = a_0$ des rhomboedrischen Mischkristalls zum Vergleich mit angegeben (+)

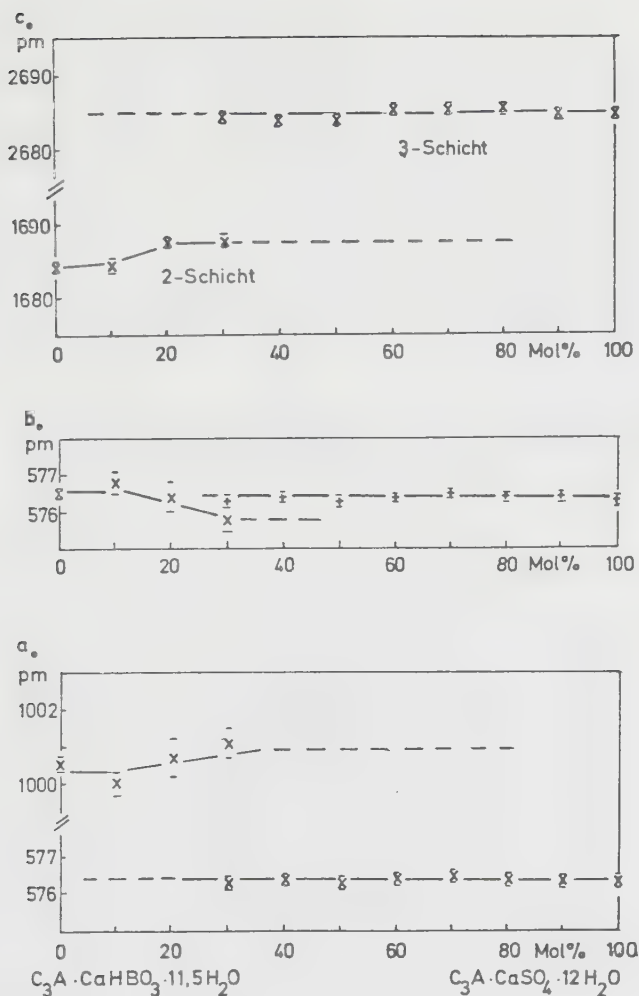


Abb. 32 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$
 bei $40^\circ C$ und 35 % r.F.

$b_o = a_o$ des rhomboedrischen Mischkristalls
 zum Vergleich mit angegeben (+)

Der SO_4^{2-} - reiche Mischkristall liegt bei 40°C im Kontakt mit der Mutterlauge als 14-Hydrat vor. Bei 100 % r.F. ändern sich seine Gitterkonstanten mit dem Verschwinden von Monoborat bei 83 Mol % Monosulfat deutlich. Die Verbindung liegt, wie bei 20°C , nach dem Trocknen auf 35 % r.F. als 12-Hydrat vor:



Zusammensetzung und Stabilitätsbereiche der Phasen im System $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaSO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ sind bei 20 und 40°C gleich. Die Ergebnisse sind in Abb. 33 zusammengefaßt.

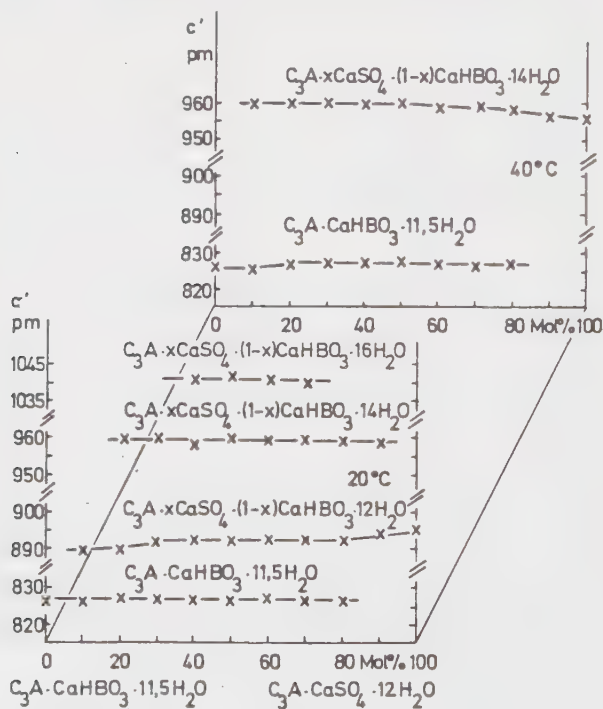


Abb. 33 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaSO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ bei 20 und 40°C und 100 % r.F.

3.1.1.2.3. Untersuchung von $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot nH_2O$ und
 $C_3A \cdot xCaSO_4 \cdot (1-x)CaHBO_3 \cdot nH_2O$

In der Literatur tauchen immer noch widersprüchliche Angaben über das Entwässerungsverhalten von $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$ auf (Tab. 5).

Eine mögliche Ursache liegt darin, daß bei normalen Reaktionstemperaturen immer eine geringe Menge Ettringit mit entstehen kann (SCHWIETE 1969). Oft ist dies nicht mehr röntgenographisch, sondern nur noch elektronenmikroskopisch zu erkennen. Ein Weg zu reinem Monosulfat ist nach KUZEL (1969) die Hydrothermalsynthese.

KUZEL(1969)		LEA(1970)		PÖLLMANN(1984)		WENDA(1984)	
12	H_2O	12	H_2O	12	H_2O	12	H_2O
				11			
10,5		10,5		10,5		10	
				10			
9		9		9		9	
		7-8		7		7-8	
		6-8		6		6	

Tab. 5 : Vergleich der Hydratstufen des $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$

In dieser Arbeit dargestellte Monosulfatproben zeigen unter dem REM deutlich die Anwesenheit von Ettringit (Bild 14). Zum Vergleich wurde deshalb ein Mischkristall $C_3A \cdot xCaSO_4 \cdot (1-x)CaHBO_3 \cdot nH_2O$ mit $x=0,9$ untersucht (Bild 15). In Abb. 34 - 36 sind TG und DSC der beiden Verbindungen wiedergegeben.

Die erste Entwässerungsstufe des "reinen" $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$ ist sicher dem Anteil an Ettringit zuzuschreiben. Die TG - Aufnahme des $C_3A \cdot 0,9CaSO_4 \cdot 0,1CaHBO_3 \cdot 12H_2O$ zeigt im fraglichen Bereich nur eine Stufe.

Tab. 6 stellt die Ergebnisse der Dehydratation des $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$ zusammen.

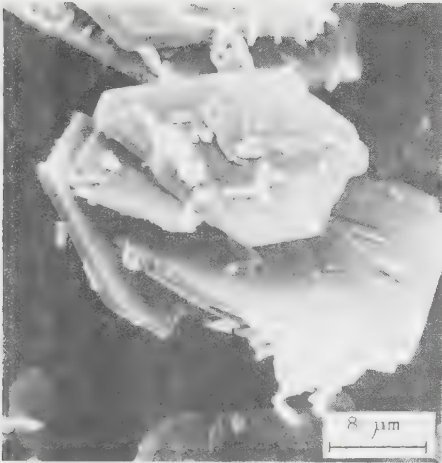


Bild 14 :
Kristalle von
 $C_3A.0.6CaSO_4.12H_2O$
mit geringen Mengen von
 $C_3A.3CaSO_4.30H_2O$
REM - Aufnahme

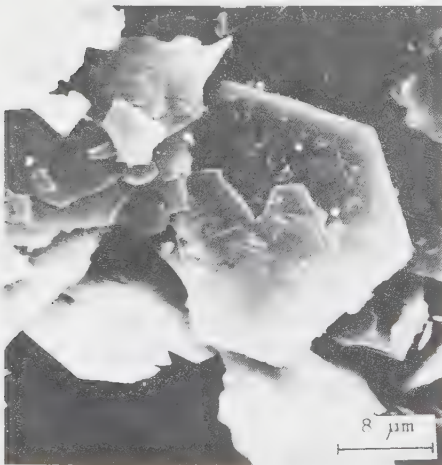


Bild 15 :
Kristalle von
 $C_3A.0.9CaSO_4.0.1CaHBO_3.12H_2O$
REM - Aufnahme

Mit der Interpretation des ersten Entwässerungspeaks in Abb. 34 als Dehydratation der Nebenphase Ettringit ist die Existenz einer instabilen Hydratstufe von Monosulfat nicht

ausgeschlossen. KUZEL (1966) und PÖLLMANN (1984) berichten über eine derartige Hydratstufe mit $H_2O < 12$, geben jedoch verschiedene Werte für den kürzesten Basisabstand c' an.

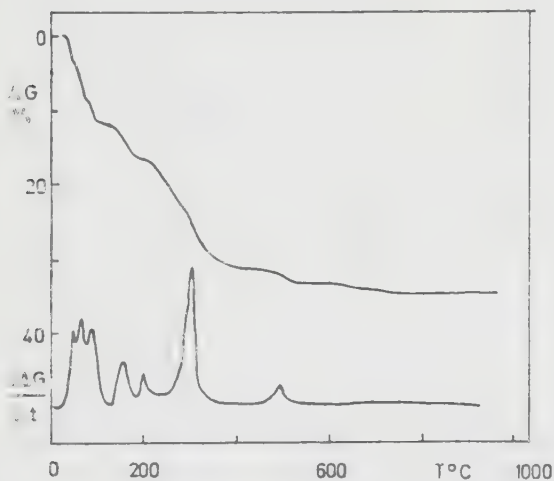


Abb. 34 :
TG - Aufnahme von
 $C_3A.CaSO_4.12H_2O$
mit geringen Mengen
 $C_3A.3CaSO_4.30H_2O$

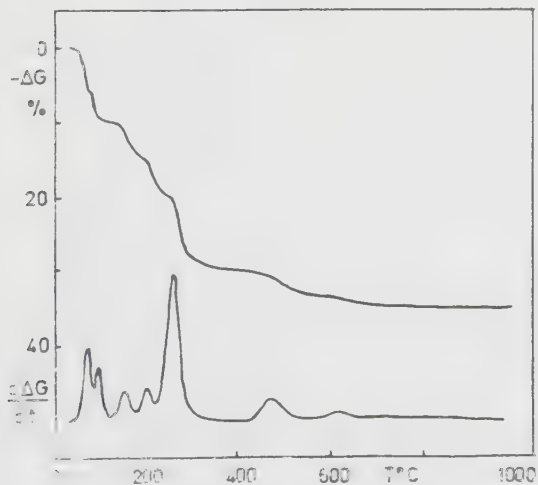


Abb. 35 :
TG - Aufnahme von
 $C_3A.0,1CaHBO_3.$
 $0,9CaSO_4.12H_2O$
kein Ettringit
vorhanden

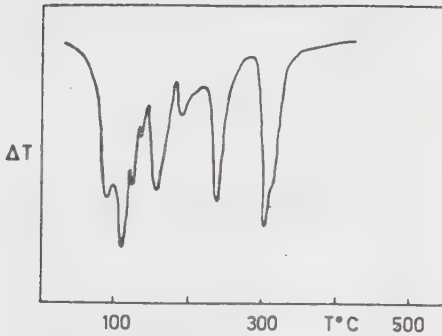


Abb. 36 :
DSC- Aufnahme von
 $C_3A \cdot 0,1CaHBO_3 \cdot$
 $0,9CaSO_4 \cdot 12H_2O$
ettringitfrei

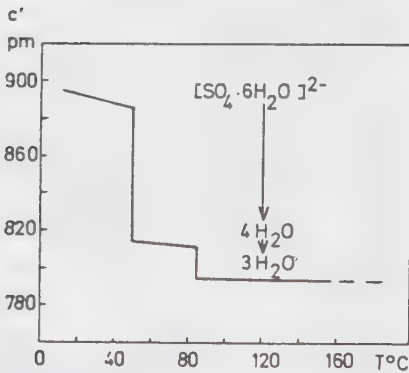


Abb. 37 :
Dehydratation von
 $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$
in der Röntgen-
heizkammer

Die DSC- Aufnahme zeigt Unterschiede zur differenzierten Gewichtsverlustkurve; es muß angenommen werden, daß das Entwässerungsverhalten noch komplizierter ist als hier dargestellt.

Die Ergebnisse der Entwässerungsversuche sind in Tab. 6 zusammengefaßt.

T °C	Gew.verlust %	Rest H ₂ O ges.	Zwischenschicht	c' pm
20	0	12	SO ₄ · 6H ₂ O	892
50	6,0	10	SO ₄ · 4H ₂ O	813
85	9,1	9	SO ₄ · 3H ₂ O	795
150	13-14	7-8		röntgen-
200	20	6		amorph
275	30,5	Zerstörung der Hauptschicht		
1100	35,0			

Tab. 6 : Dehydratation von $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$

Die infrarotspektroskopische Untersuchung von $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$ liefert weitere strukturelevante Daten. In hoch aufgelösten Spektren kann eine Aufspaltung der ν_3 - SO₄ - Schwingung in ein Triplett beobachtet werden; zusätzlich tritt die totalsymmetrische ν_1 SO₄ - Bande auf. Dies bedeutet, daß die Symmetrie der SO₄ - Gruppe niedriger sein muß als T_h. ADLER und KERR (1965) geben für diesen Sachverhalt monokline oder triklin Symmetrie an. Eine Diskussion der Symmetrie findet sich bei PÖLLMANN (1984).

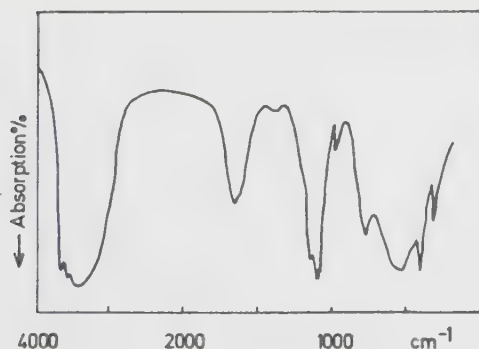


Abb. 38 :
IR - Spektrum von
 $C_3A \cdot CaSO_4 \cdot 12H_2O$

Wellenzahl cm^{-1}	Zuordnung
3680	OH (Hauptschicht)
3600 - 3200	H_2O ν_1/ν_3 (Zwischenschicht)
1650	H_2O ν_2
1160	SO_4 ν_3
1110	
1085	
980	SO_4 ν_1
780	$\text{Al}(\text{OH})_6$ bzw. AlO_6
600 - 500	$\text{Al}(\text{OH})_6$ bzw. AlO_6
420	Ca-O
295	Ca-O

Tab. 7 : IR - Frequenzen von $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaSO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$

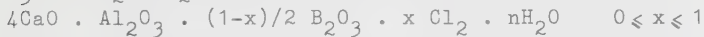
3.1.1.3. System $C_3A.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A.CaCl_2 \cdot 10H_2O$

Die Bedeutung des $CaCl_2$ für die Chemie des Zements gab Anlaß zur Untersuchung chloridhaltiger Systeme.

TURRIZIANI und SCHIPPA (1955) fanden im System TCAH - $C_3A.CaCl_2 \cdot 10H_2O$ unbegrenzte Mischbarkeit; ROBERTS (1968) grenzte den Bereich der Mischkristallbildung ein.

Nach KUZEL (1966) tritt Monochlorid in zwei polymorphen Modifikationen auf: $\alpha-C_3A.CaCl_2 \cdot 10H_2O$ mit monokliner Zweischichtstruktur geht bei $28^\circ C$ in β -Monochlorid mit rhomboedrischer Sechsschichtstruktur über. Als Folge dieser Phasenumwandlung treten im System $C_3A.Ca(OH)_2 \cdot nH_2O - C_3A.CaCl_2 \cdot 10H_2O$ Sprungstellen der Gitterkonstanten auf (PÖLLMANN 1980 und 1982).

Für die Untersuchung des Systems $C_3A.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A.CaCl_2 \cdot 10H_2O$ wurden folgende Synthesen angesetzt:



Al_2O_3 wurde als $CaO \cdot Al_2O_3$, B_2O_3 als H_3BO_3 und Cl_2 als $CaCl_2 \cdot 2H_2O$ eingewogen. Nach drei Monaten wurden die Bodenkörper abfiltriert und untersucht.

3.1.1.3.1. Ergebnisse bei $20^\circ C$

Abb. 39 und 40 zeigen anhand von c' die Phasenverhältnisse im System bei $20^\circ C$ und 100 bzw. 35 % r.F.

Chlorid wird quantitativ in einen Mischkristall der Zusammensetzung $C_3A \cdot (1-x)CaHBO_3 \cdot xCaCl_2 \cdot (11,5-1,5x)H_2O$ mit $\approx 0,17 \leq x \leq 1$ eingebaut. Die Untergrenze des Mischkristallbereichs läßt sich nicht exakt angeben. Die Gitterkonstanten des Mischkristalls bleiben unter 20 Mol % Monochlorid unverändert; $C_3A.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ kann aber bis 25 Mol % Monochlorid nachgewiesen werden. Da die Zusammensetzung des Grenzmischkristalls mit der Sechsschichtstruktur vereinbar sein muß, ist anzunehmen, daß im Bereich von 25 bis

17 Mol % Monochlorid der Teil des HBO_3^{2-} durch OH^- ersetzt wird, der zur Bildung des stabilen $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ benötigt wird. Die Zusammensetzung des Grenzmischkristalls kann damit angegeben werden:

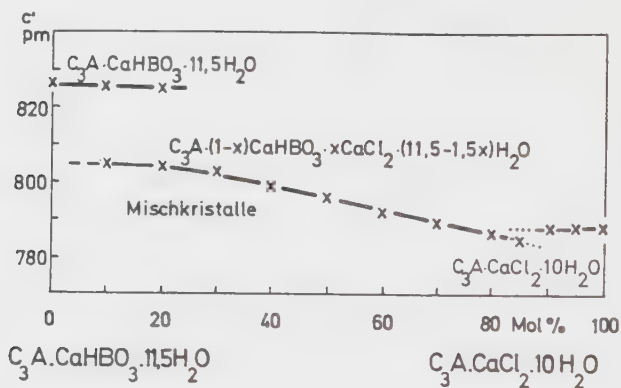
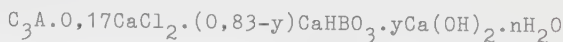


Abb. 39 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ - $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ bei 20°C und 100 % r.F.

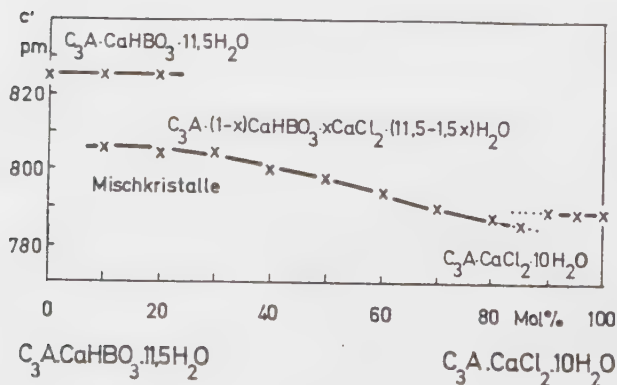


Abb. 40 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ - $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ bei 20°C und 35 % r.F.

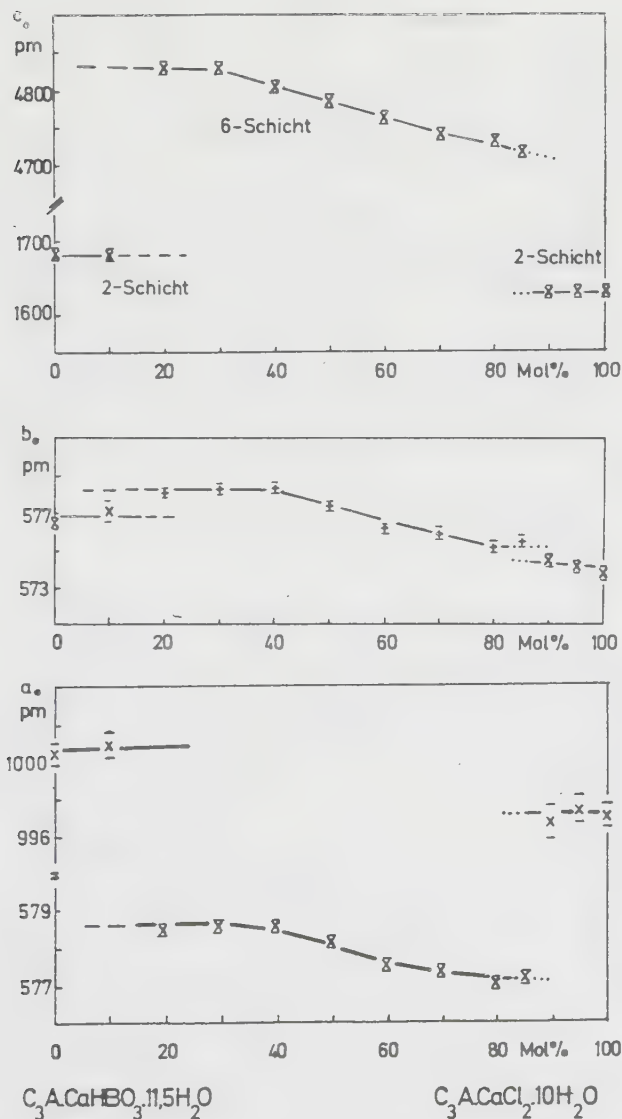


Abb. 41 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$ bei 20°C und 100 % r.F.

$b_0 = a_0$ des rhomboedr. Mischkristalls zum Vergleich mit angegeben (+)

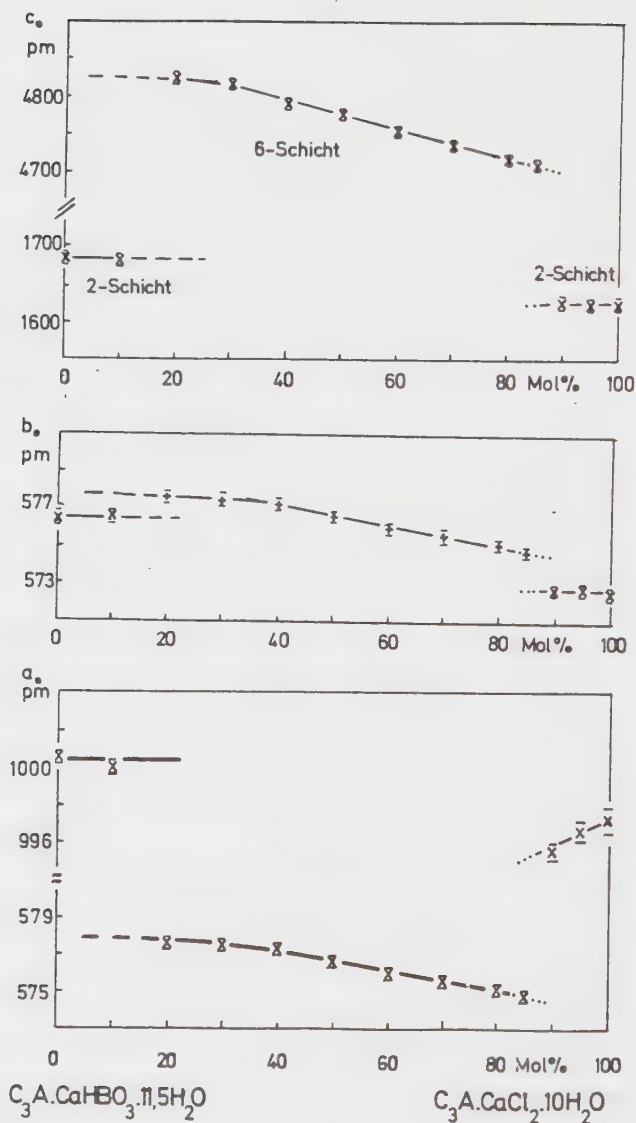


Abb. 42 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$
 bei 20°C und 35 % r.F.
 $b_0 = a_0$ des rhomboedr. Mischkristalls zum
 Vergleich mit angegeben (+).

In den Abb. 41 und 42 sind die entstandenen Phasen durch ihre Überstrukturen charakterisiert. Die Endkomponenten und der chloridreiche Mischkristall besitzen eine monokline Zweischichtstruktur; dem rhomboedrischen Mischkristall kommt eine Sechsschichtstruktur zu.

Die Gitterkonstanten a_0 und c_0 nehmen in gleicher Weise mit zunehmendem Chloridgehalt der Bodenkörper ab; eine Abhängigkeit von der relativen Feuchte ist nicht zu erkennen.

Wie die thermischen Analysen zeigen, nimmt der Gehalt an Zwischenschichtwasser zur chloridreichen Seite des Systems hin ab. Bei einem Cl- Gehalt des Mischkristalls von 5/6 Monochlorid ändert sich die Röntgensymmetrie von rhomboedrisch $R\ 3c$ oder $R\ \bar{3}c$ nach monoklin Cc oder $C\ 2/c$.

(vgl. hierzu 3.1.1.3.2.).

3.1.1.3.2. Ergebnisse bei 40°C

Die Untersuchung bei 40°C erbringt im chloridarmen Teil des Systems keine Änderung gegenüber 20°C. Die Gitterkonstanten gleichen denen der Bodenkörper bei 20°C; zwischen den Aufnahmen bei 100 und 35 % r.F. bestehen kaum Unterschiede.

Im chloridreichen Teil des Systems ist der rhomboedrische Mischkristall bis 90 Mol % Monochlorid in den Röntgenogrammen zu erkennen. Bei den Proben mit Cl - Gehalten > 83 Mol % Monochlorid liegt dem sicher ein Präparationseffekt zugrunde, da DSC - Aufnahmen, die ohne mechanische Beanspruchung der Teilchen durchgeführt werden können, den endothermen Peak der Umwandlung zeigen. Die Aktivierungsenergie für die Phasenumwandlung wird also bei hohen Cl-Gehalten bereits bei der Präparation für die Röntgenaufnahme überschritten. In den Gitterkonstantendiagrammen ist dieser Bereich punktiert gekennzeichnet.

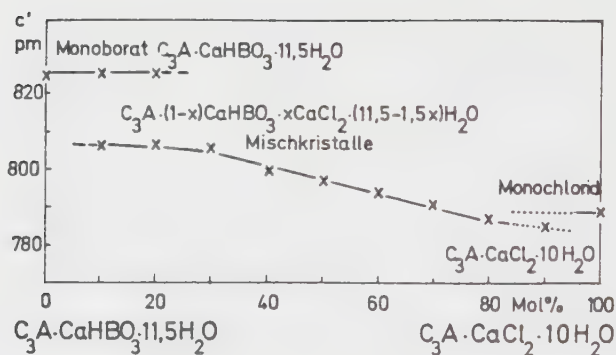


Abb. 43 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$ bei $40^\circ C$ und 100 % r.F.

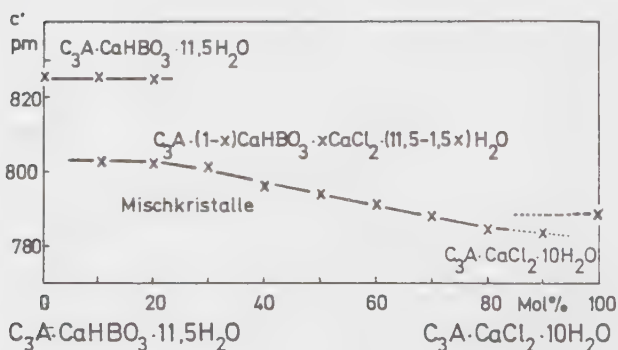


Abb. 44 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$ bei $40^\circ C$ und 35 % r.F.

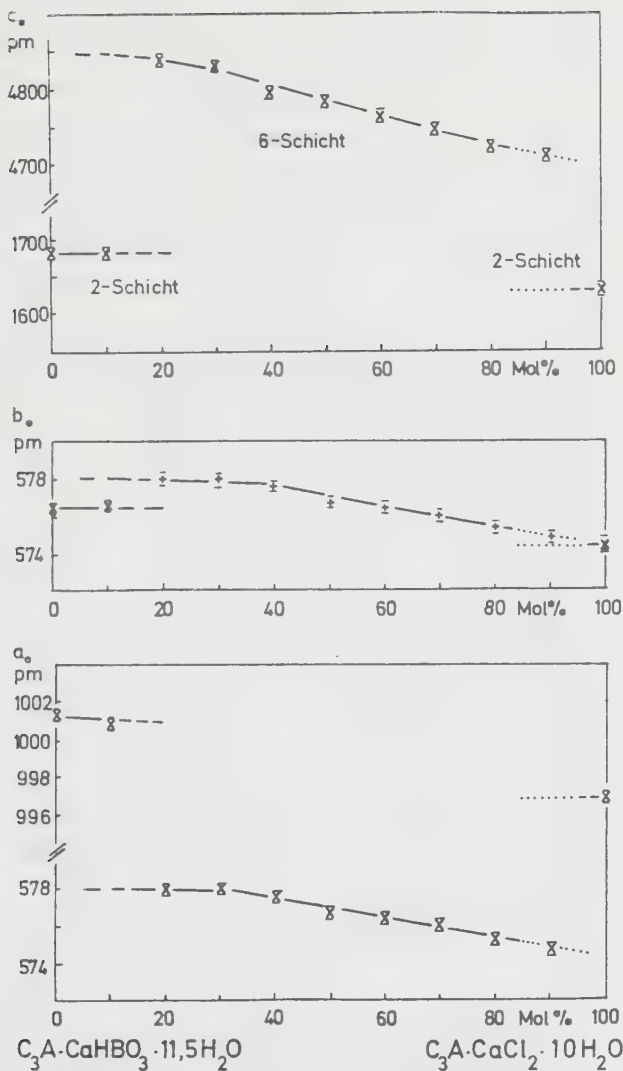


Abb. 45 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$
 bei 40°C und 100 % r.F.
 $b_o = a_o$ des rhomboedr. Mischkristalls zum
 Vergleich mit eingetragen (+)

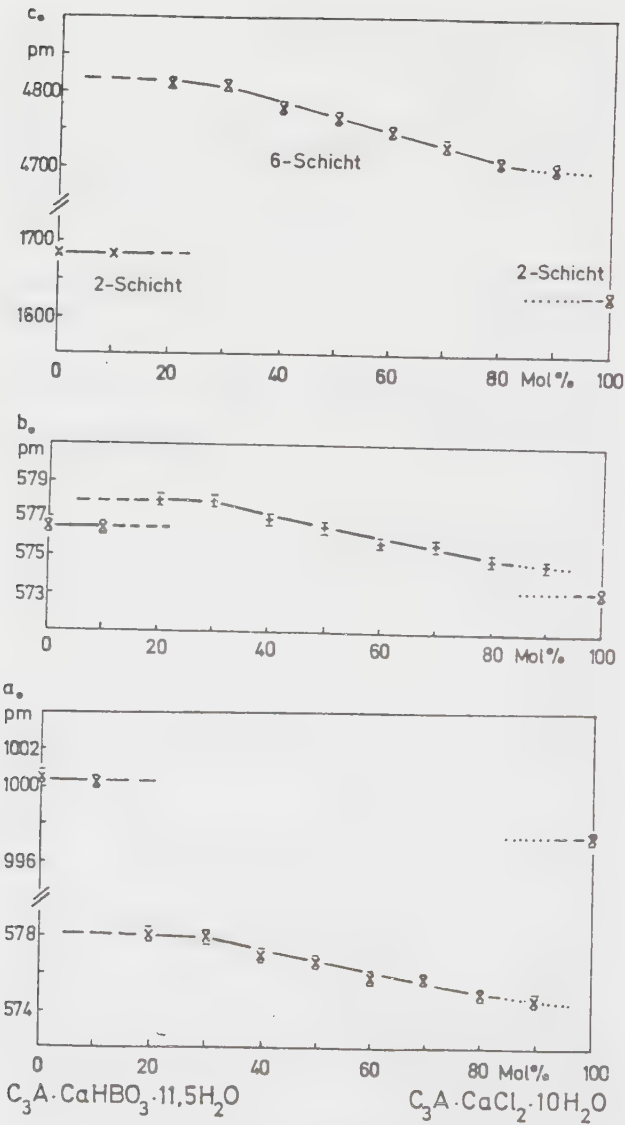


Abb. 46 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - CaCl_2 \cdot 10H_2O$
 bei 40°C und 35 % r.F.
 $b_0 = a_0$ des rhomboedr. Mischkristalls zum
 Vergleich mit angegeben (+)

Die Zusammensetzung der Mischkristalle kann wie im System bei 20°C angegeben werden:

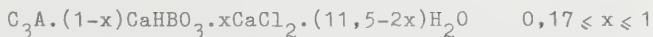


Abb. 47 bietet anhand der Schichtdicken c' eine Übersicht über die Bodenkörper im System $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ - $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ bei 20 und 40°C.

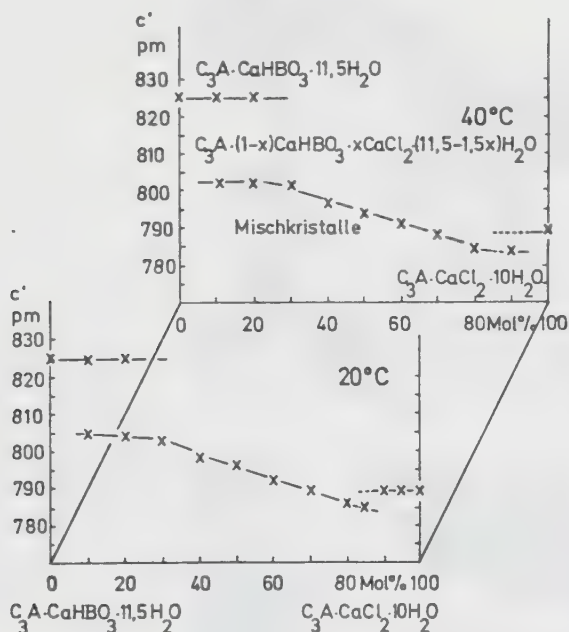
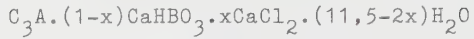


Abb. 47 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ - $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ bei 20 und 40°C und 35 % r.F.

3.1.1.3.3. Untersuchung der Mischkristalle



Die Mischkristalle des Systems $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ - $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ sind submikroskopisch klein; erst REM - Aufnahmen erschließen ihre flachtafelige, pseudo-hexagonale Gestalt (Bild 16 und 17).

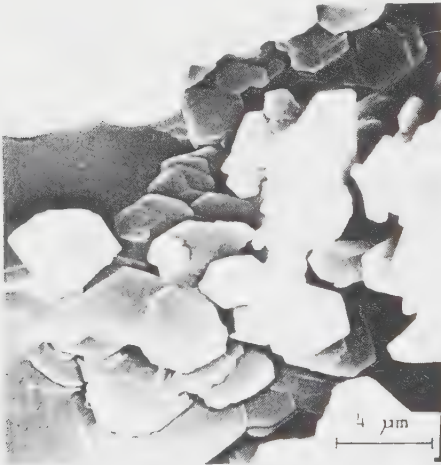
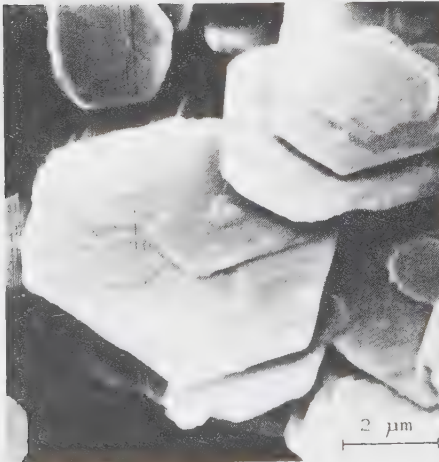
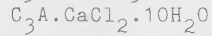
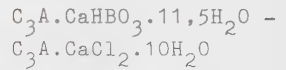


Bild 16 und 17 :
Mischkristalle im
System



Besonderes Interesse verdient das Dehydratationsverhalten, das in den Abb. 48 - 50 charakterisiert wird.

Anhand von DSC - Aufnahmen läßt sich die Entwässerung in Abhängigkeit von der Zusammensetzung verfolgen (Abb. 48). Monochlorid zeigt die Phasenumwandlung monoklin nach rhomboedrisch, um dann in einer einzigen Stufe die relativ fest gebundenen H_2O der Zwischenschicht abzugeben. Diese Stufe teilt sich beim rhomboedrischen Mischkristall in zwei Einzelpeaks auf, die auch in der Röntgenheizkammer aufgelöst werden können (Abb. 49).

Tab. 8 faßt die Ergebnisse der Entwässerungsversuche zusammen. Als Vergleich sind die Werte für Monochlorid angegeben.

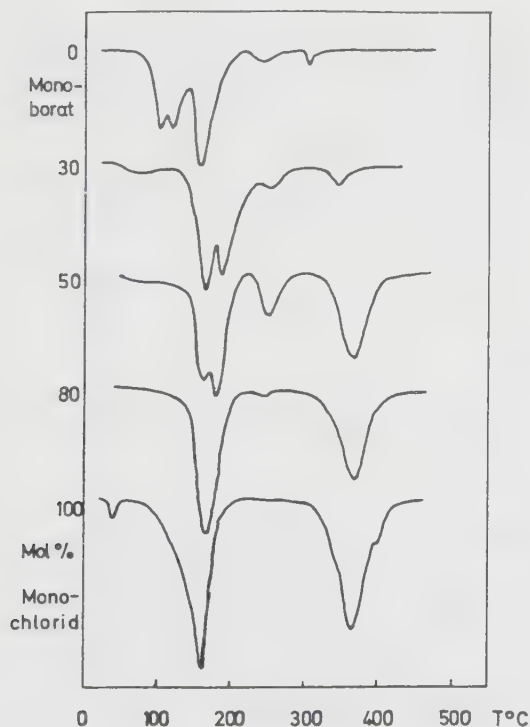


Abb. 48 :
DSC - Aufnahmen
im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ -
 $C_3A \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$

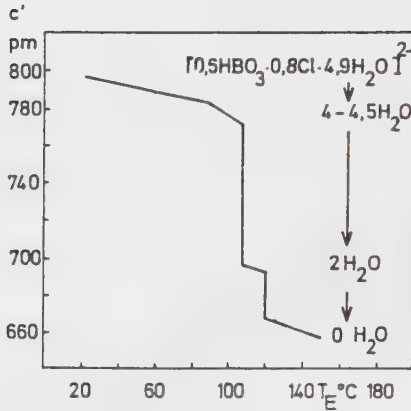


Abb. 49 :
Entwässerung eines
Mischkristalls ($x=0,4$)
in der Röntgen-
heizkammer

Bis 100°C äußert sich die Entwässerung in der Röntgenheizkammer durch eine kontinuierliche Verschiebung der Basispeaks. Nach Abgabe des Zwischenschichtwassers werden die Verbindungen bei 250°C röntgenamorph.

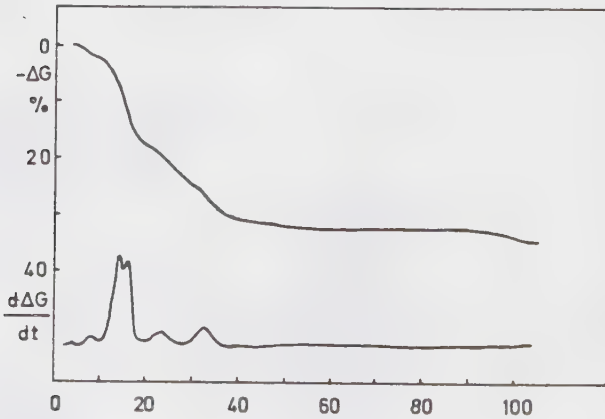


Abb. 50 : TG - Aufnahme eines Mischkristalls ($x=0,4$)
R: 1°/min (TG) ; 10°/min (DTG)

T °C	Zwischenschicht	c' pm
20 bis	$0,6\text{HBO}_3 \cdot 0,8\text{Cl} \cdot 4,9\text{H}_2\text{O}$	798
100	$0,6\text{HBO}_3 \cdot 0,8\text{Cl} \cdot 4-4,5\text{H}_2\text{O}$	775
105	$0,6\text{HBO}_3 \cdot 0,8\text{Cl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	690
110	$0,6\text{HBO}_3 \cdot 0,8\text{Cl} \cdot 0\text{H}_2\text{O}$	660

Tab. 8 : Entwässerung der Mischkristalle
 $\text{C}_3\text{A} \cdot (1-x)\text{CaHBO}_3 \cdot x\text{CaCl}_2 \cdot (11,5-2x)\text{H}_2\text{O}$
 am Beispiel $x = 0,4$

Im Vergleich dazu Monochlorid:

T °C	Zwischenschicht	c' pm
20	$2 \text{ Cl} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	780
85	$2 \text{ Cl} \cdot 0\text{H}_2\text{O}$	690

Tab. 9 : Entwässerung von $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$

3.1.1.4. System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ -
 $C_3A \cdot O,5CaCO_3 \cdot O,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$

Halbcarbonat $C_3A \cdot O,5CaCO_3 \cdot O,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O \triangleq C_4A \cdot 1/2CO_2 \cdot 12H_2O$ bildet sich bereits bei geringer Einwirkung von CO_2 aus der Luft auf Calciumaluminathydrate. Bei der Zugabe von B_2O_3 zu Zementen muß daher mit Mischkristallen aus dem System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ - $C_3A \cdot O,5CaCO_3 \cdot O,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$ gerechnet werden. Wie von WENDA (1980) gezeigt wird, beginnt das Stabilitätsgebiet derartiger Mischkristalle bereits bei B_2O_3 - Gehalten unter denen dieses Systems. Die große röntgenographische Ähnlichkeit beider Endverbindungen erfordert die Anwendung weiterer aussagekräftiger Methoden, wie z. B. die optische Untersuchung genügend großer Kristalle.

Die Syntheseansätze im System hatten folgende Zusammensetzung:

$4 CaO \cdot Al_2O_3 \cdot (1-x)/2 B_2O_3 \cdot x/2 CO_2 \cdot nH_2O \quad 0 \leq x \leq 1$
 B_2O_3 wurde als H_3BO_3 , CO_2 als $CaCO_3$ eingebracht. Al_2O_3 kam als $Al(OH)_3$ (Bayerit) bzw. als $CaO \cdot Al_2O_3$ zum Einsatz, da versucht werden mußte, zum einen große Kristalle, zum anderen kürzere Reaktionszeiten zu erhalten.

Nach drei Monaten bei Temperaturen von 20, 40 bzw. 60°C wurden die Bodenkörper abfiltriert und untersucht.

Ansätze zur Züchtung größerer Kristalle wurden bis zu zwölf Monaten bei 40°C belassen.

3.1.1.4.1. Ergebnisse bei 20°C

Das System ist gekennzeichnet durch lückenlose Mischbarkeit der Endkomponenten (Abb. 51 und 52). Bei 33 Mol % Halbcarbonat ändert sich die Symmetrie der Mischkristalle von der monoklinen Zweischichtstruktur des $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ zur rhomboedrischen Sechsschichtstruktur des Halbcarbonats.

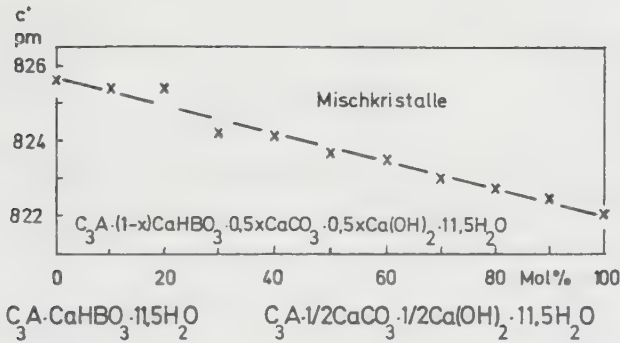


Abb. 51 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$ bei $20^\circ C$ und 100 % r.F.

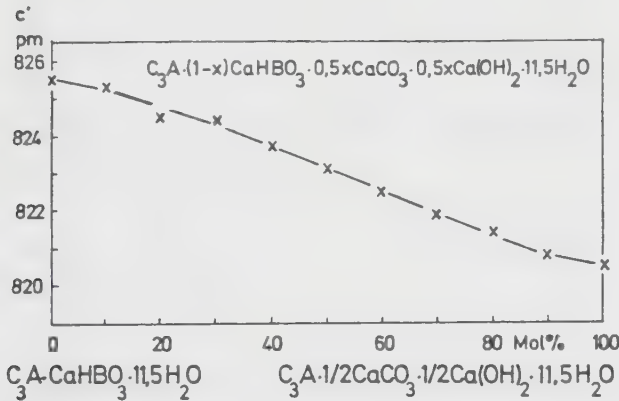


Abb. 52 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$ bei $20^\circ C$ und 35 % r.F.

Die Sprungstelle kann kristalloptisch durch das Verschwinden der Sektoren der monoklinen Mischkristalle festgelegt werden.

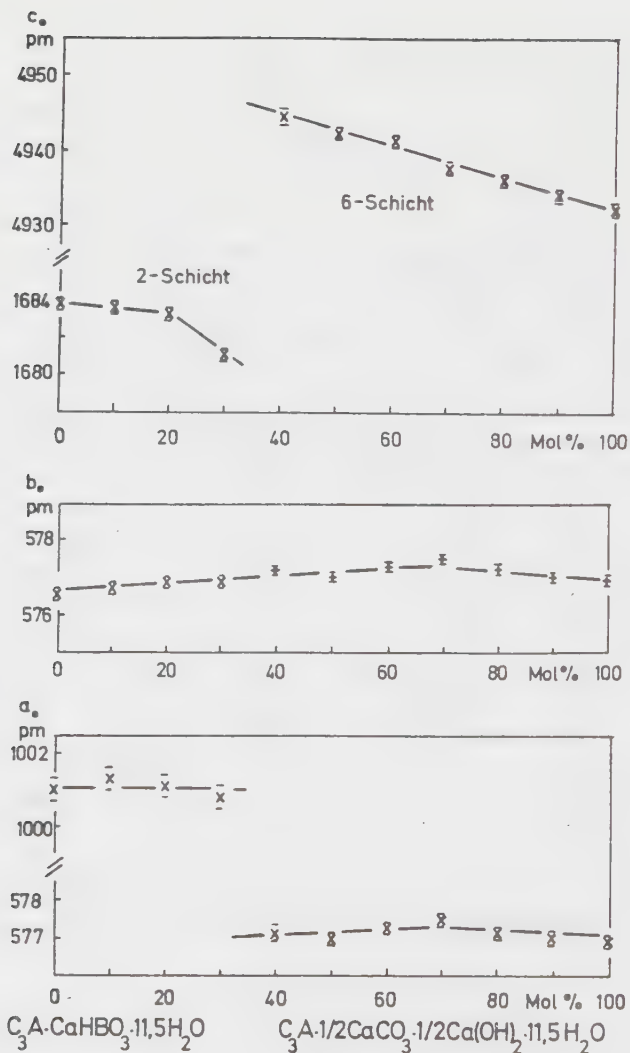


Abb. 53 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$
 bei 20°C und 100 % r.F.
 $b_0 = a_0$ des rhomboedr. Mischkristalls zum
 Vergleich mit angegeben (+)

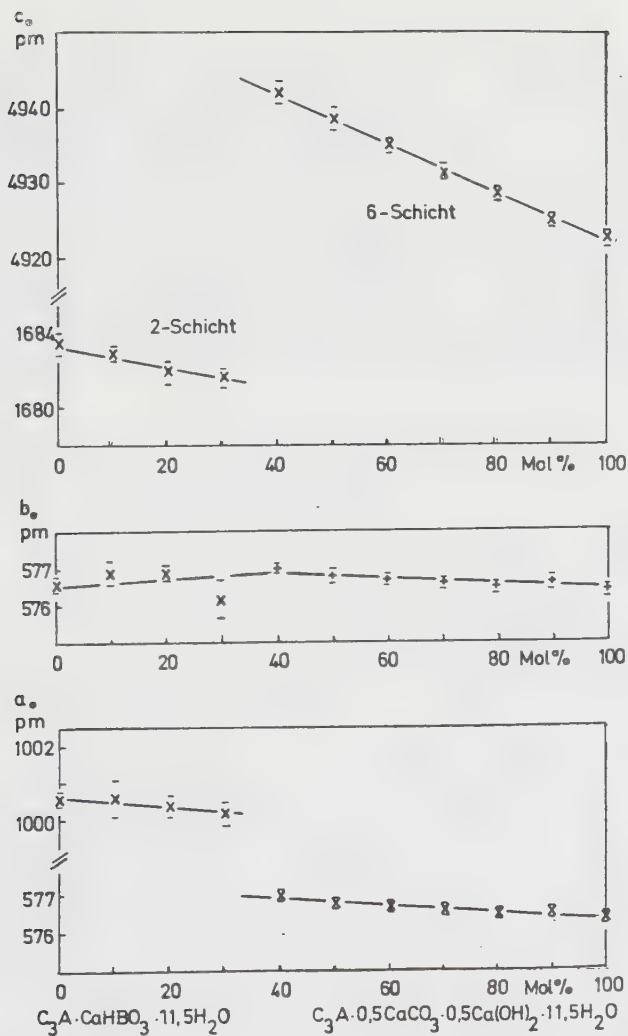


Abb. 54 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$
 bei 20°C und 35 % r.F.
 b₀ = a₀ des rhomboedr. Mischkristalls zum
 Vergleich mit angegeben (+)

Eine Abhängigkeit der Gitterkonstanten a_0 bzw. b_0 von der Zusammensetzung ist nicht zu erkennen. Auf der carbonatreichen Seite des Systems liegen die Werte für c_0 bzw. c' bei 35 % r.F. niedriger als bei 100 % r.F. Dies kann auf die relativ lockere Bindung eines Zwischenschicht- H_2O zurückgeführt werden.

Abb. 55 stellt anhand von DSC- Aufnahmen das Entwässerungsverhalten im System zusammen. Die Temperatur der ersten Entwässerungsstufe sinkt mit zunehmendem Carbonatgehalt; bei der zweiten Stufe kehrt sich dieses Verhalten um.

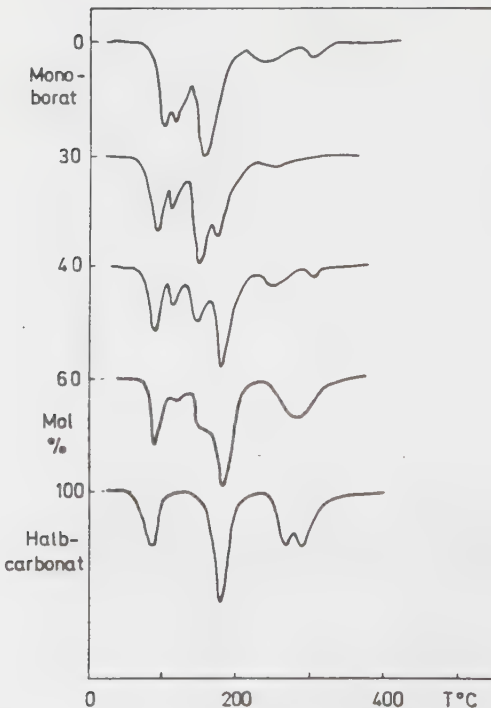


Abb. 55 :
DSC - Aufnahmen
im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ -
 $C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot$
 $0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$
bei 20°C

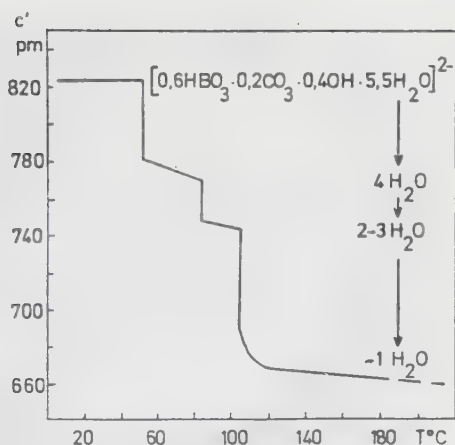


Abb. 56 :
Entwässerung eines
Mischkristalls ($x=0,4$)
in der Röntgen-
heizkammer mit
Angabe der
Zwischenschicht

Abb. 56 zeigt die Dehydratation eines Mischkristalls der Zusammensetzung $\text{C}_3\text{A} \cdot 0,6\text{CaHBO}_3 \cdot 0,2\text{CaCO}_3 \cdot 0,2\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ in der Röntgenheizkammer. Tab. 10 faßt die Ergebnisse der Entwässerungsversuche zusammen.

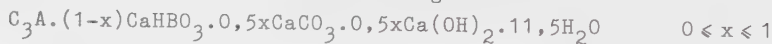
T $^{\circ}\text{C}$	Zwischenschicht ($x=0,4$)	c' pm
20	$0,6\text{HBO}_3 \cdot 0,2\text{CO}_3 \cdot 0,4\text{OH} \cdot 5,5\text{H}_2\text{O}$	825
55	" " " 4 H_2O	770
85	" " " 2-3 H_2O	740
110	" " " 1-1,5 H_2O	670
ab 190	Entwässerung der Hauptschicht 0 H_2O	-

Tab. 10 : Entwässerungsverhalten eines Mischkristalls ($x=0,4$) des Systems $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

Zus.setzung der Einwaage Molverh. $\text{HBO}_3^{2-}/\text{Al}_2\text{O}_3 \quad \triangleq \quad \text{B}_2\text{O}_3/\text{Al}_2\text{O}_3$	% B_2O_3 in Lsg. bez. auf Einwaage B_2O_3
1.0	0.9
0.9	0.9
0.8	0.9
0.7	0.7
0.6	0.7
0.5	0.9
0.4	0.9
0.3	0.9
0.2	0.8
0.1	0.8

Tab. 11 : Löslichkeit des B_2O_3 im System
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} -$
 $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

Nach den chemischen und thermischen Analysen kommt den Mischkristallen die Zusammensetzung zu :



In struktureller Schreibweise entspricht dies:



An der Sprungstelle mit $x = 0,33$ liegt folgende Zwischenschicht vor: $(2/3 \text{ HBO}_3 \cdot 1/6 \text{ CO}_3 \cdot 1/3 \text{ OH} \cdot 5,5 \text{ H}_2\text{O})$

Bei 20°C läßt sich der Austausch der Anionen in den Mischkristallen formulieren:



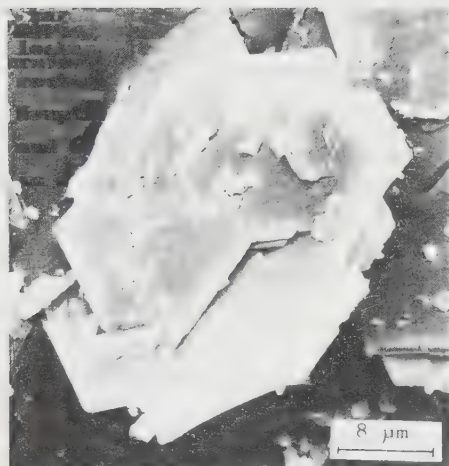
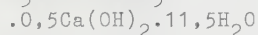
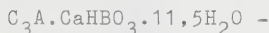


Bild 18 :

Mischkristalle im System



bei 20°C

REM - Aufnahme

3.1.1.4.2. Ergebnisse bei 40°C

Mit zunehmender Temperatur nimmt die Stabilität von Halbcarbonat zugunsten von Monocarbonat $C_3A.CaCO_3.11H_2O$ ab. Für das System Monoborat - Halbcarbonat bedeutet dies, daß im carbonatreichen Drittel neben den Mischkristallen geringe Mengen Monocarbonat, C_3AH_6 und CH gebildet werden. Die Mengenabschätzung über das Intensitätsverhältnis der Basisreflexe $I_{\text{Monocarbonat}} / I_{\text{Halbcarbonat}}$ liefert Werte von maximal 10 % $C_3A.CaCO_3.11H_2O$.

Die Mischkristallbildung ist wie bei Raumtemperatur lückenlos; auch die Sprungstelle von monokliner zu rhomboedrischer Symmetrie liegt bei 33 Mol % Halbcarbonat.

Im carbonatreichen Teil des Systems liegt c_0 bei 35 % r.F. um 15 pm niedriger als bei 100 % r.F.; die Basisabstände sind geringer als bei 20°C.

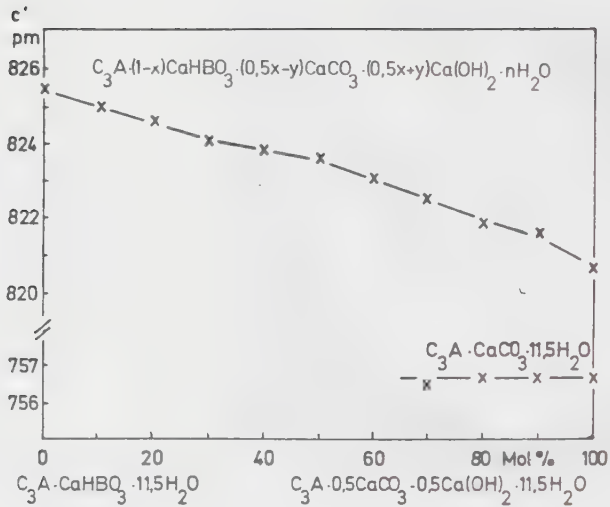


Abb. 57 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$ bei $40^\circ C$ und 100 % r.F.

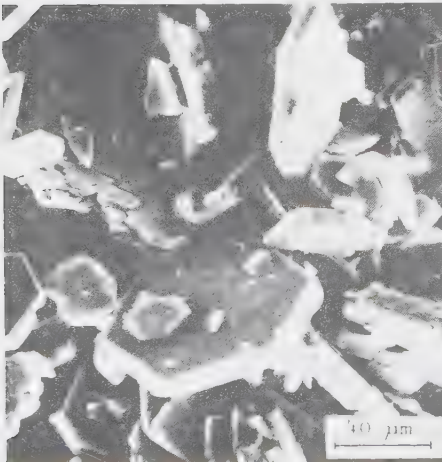


Bild 19 :
Mischkristalle
im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$
bei $40^\circ C$

REM - Aufnahme

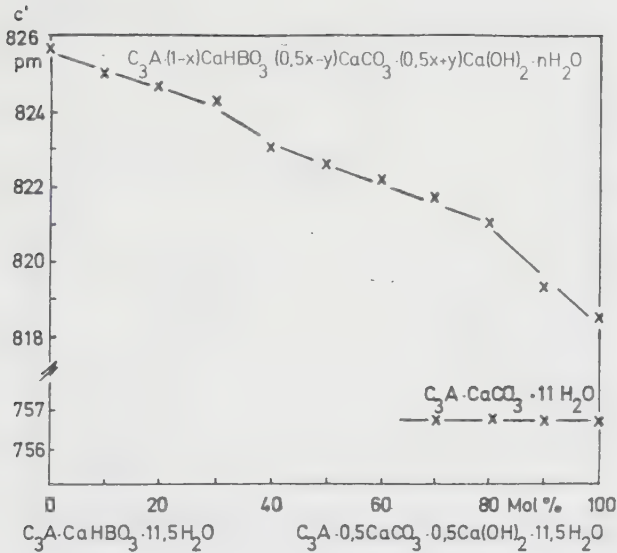


Abb. 58 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$
 bei $40^\circ C$ und 35 % r.F.

Die Basisabstände c' (Abb. 57 und 58) sind geringer als bei den entsprechenden relativen Feuchten bei $20^\circ C$. Für Monocarbonat kann nur c' angegeben werden.

Durch das Auftreten von $C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ im System Monoborat-Halbcarbonat bei $40^\circ C$ kann die Zusammensetzung der Mischkristalle in diesem Teil des Systems nicht exakt bestimmt werden. Der Anteil CO_3^{2-} , der zur Bildung von Monocarbonat verbraucht wird, muß in den Mischkristallen durch 2 OH^- ersetzt werden. Die Zusammensetzung kann angegeben werden:



mit $0 \leq x \leq 1$

$y > 0$

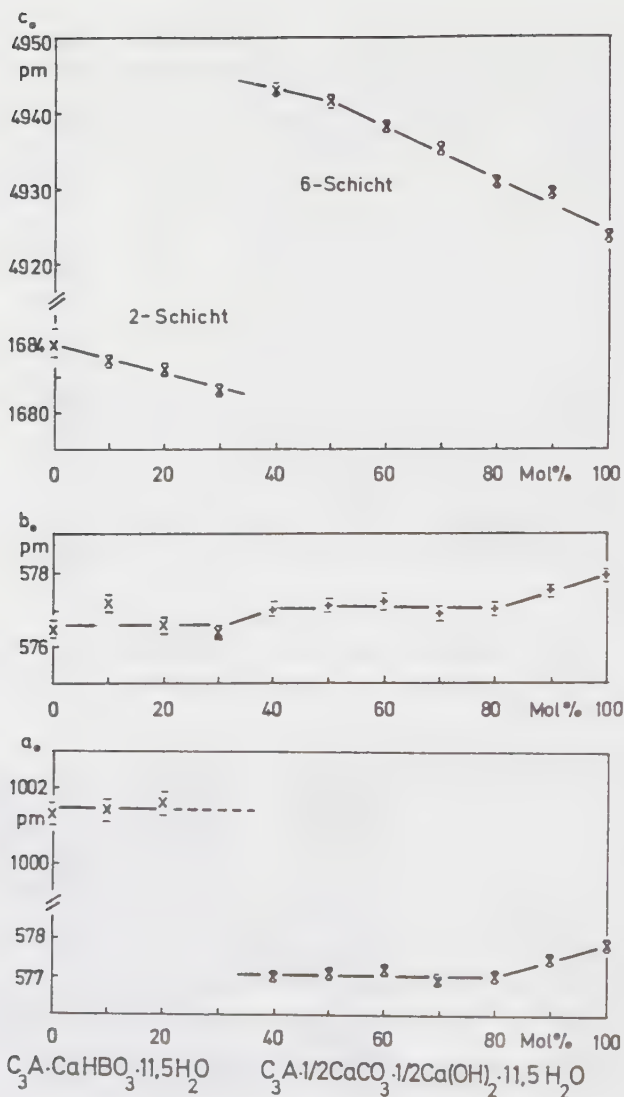


Abb. 59 : Gitterkonstanten der Mischkristalle im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$
 bei 40°C und 100 % r.F.

$b_0 = a_0$ des rhomboedr. Mischkristalles zum
 Vergleich mit angegeben (+)

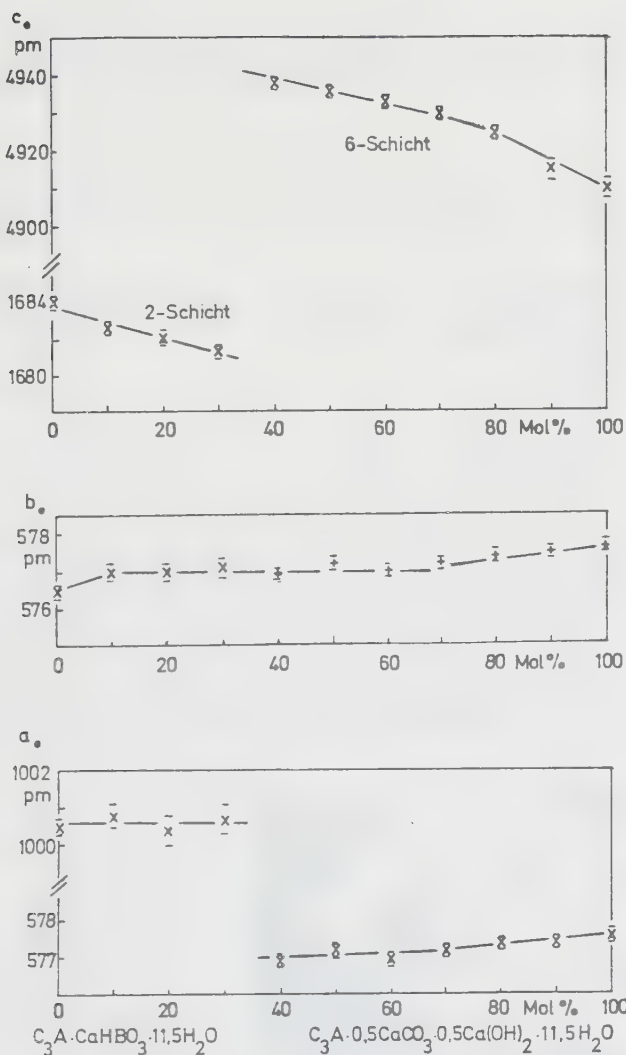


Abb. 60 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$
 bei 40°C und 35 % r.F.
 b₀ = a₀ der rhomboedr. Mischkristalle zum Vergleich
 mit angegeben (+)

In oxidischer Schreibweise wird dies ausgedrückt:



$$\text{mit } 0 \leq x \leq 1$$

$$y > 0$$

Durch die relativ geringen Mengen an Begleitphasen im carbonatreichen Teil des Systems läßt sich die Abschätzung treffen: $y \longrightarrow 0$

Diese Phasenbreite der Mischkristalle bezüglich des OH^- - und CO_3^{2-} - Gehaltes findet sich im Halbcarbonat wieder (FISCHER 1977).

3.1.1.4.3. Ergebnisse bei 60°C

Bei 60°C wird im System Monoborat - Halbcarbonat die Endverbindung $\text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ nicht mehr gebildet; statt dessen entstehen $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$, C_3AH_6 und CH. Ihre Mengen nehmen mit fallendem CO_3 - Angebot im System ab. In Bild 20 erkennt man neben den regelmäßig begrenzten Mischkristallen einen länglichen Kristall von Monocarbonat (unten Mitte).

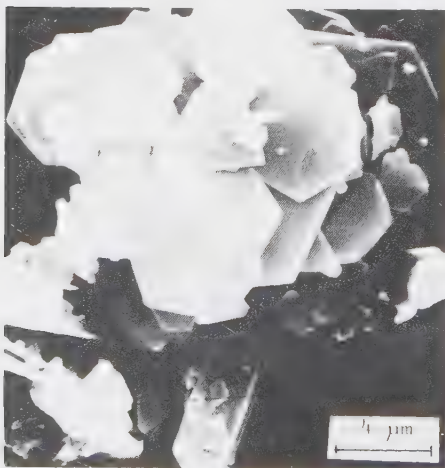
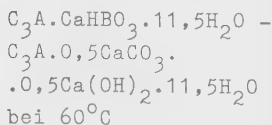


Bild 20 :

Mischkristalle im System



REM - Aufnahme

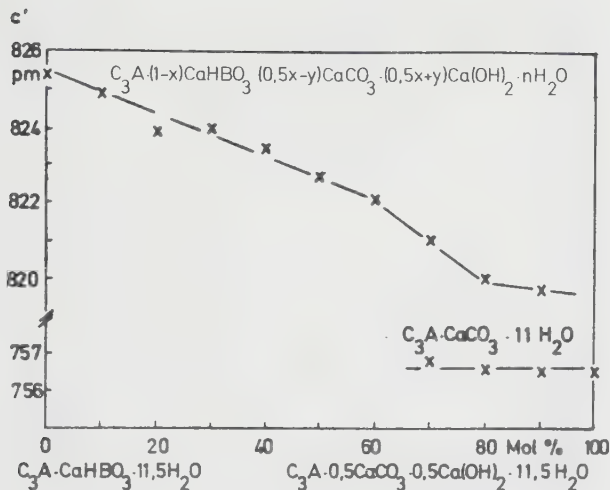


Abb. 61 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$ bei $60^\circ C$ und 100 % r.F.

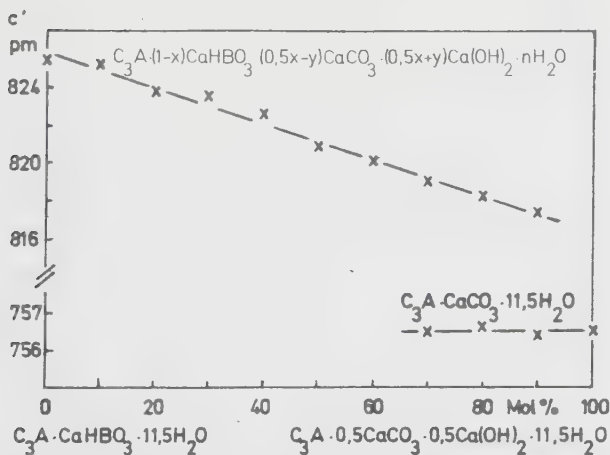


Abb. 62 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$ bei $60^\circ C$ und 35 % r.F.

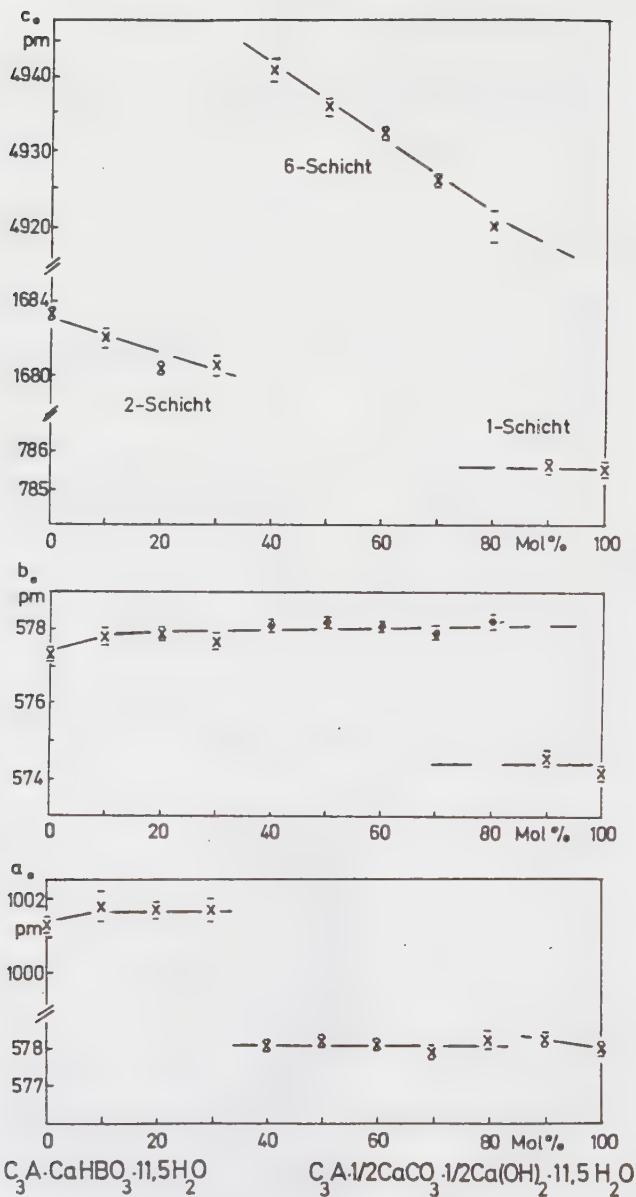


Abb. 63 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$
 bei 60°C und 100 % r.F.

$b_0 = a_0$ der rhomboedr. Mischkristalle zum Vergleich
 mit angegeben (+)

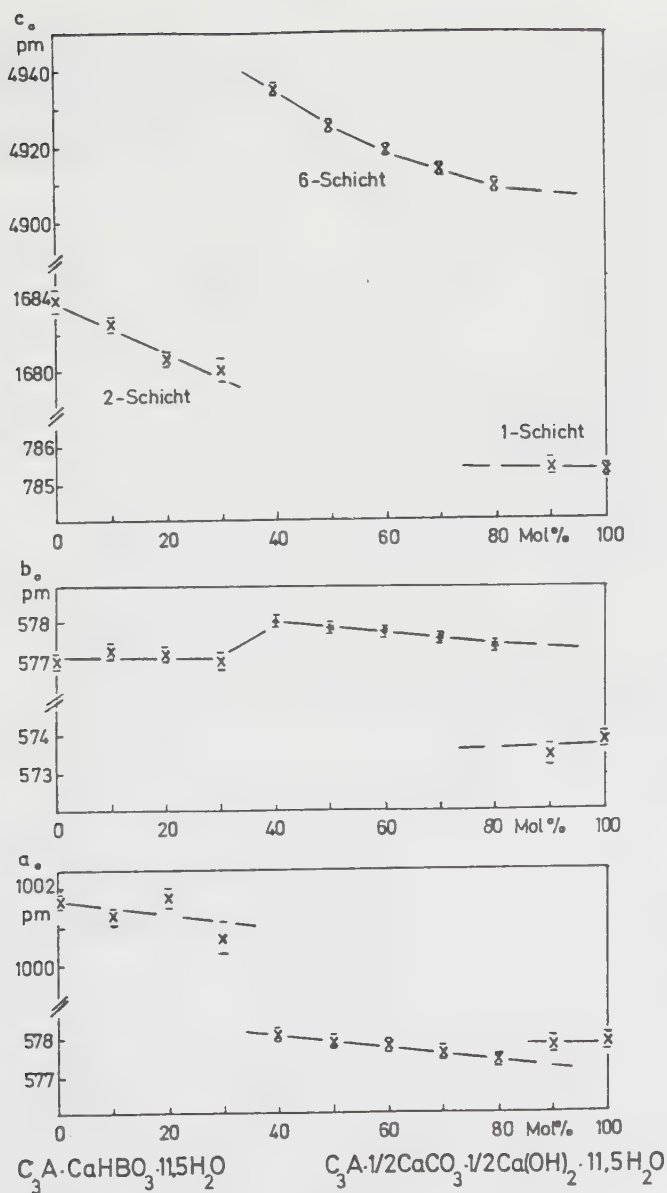


Abb. 64 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$
 bei 60°C und 35 % r.F.

$b_o = a_o$ der rhomboedr. Mischkristalle zum Vergleich

Die Gitterkonstanten c' bzw. c_o fallen bei zunehmendem CO_3^{2-} - Angebot noch stärker als bei 40 und 20°C; die Unterschiede der Werte bei relativen Feuchten von 100 bzw. 35 % bewegen sich in ähnlichen Größenordnungen wie bei niedrigeren Temperaturen. a_o bzw. b_o bleiben im System praktisch unverändert.

Die chemische Zusammensetzung der Mischkristalle kann aufgrund der Existenz der Begleitphasen nicht exakt angegeben werden. Gegenüber niedrigeren Temperaturen ist bei 60°C die Bildung von $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$ stark begünstigt; die damit dem Mischkristall entzogenen CO_3^{2-} - Anionen müssen durch 2 OH^- ersetzt werden.

Wie im Falle des 40°C - Ansatzes läßt sich die Zusammensetzung der Mischkristalle nur allgemein angeben:



mit $0 \leq x \leq 1$ $y > 0$

In oxidischer Schreibweise:



Anhand der Schichtdicken c' der Bodenkörper gibt Abb. 65 einen Überblick über die Ergebnisse im System Monoborat - Halbcarbonat.

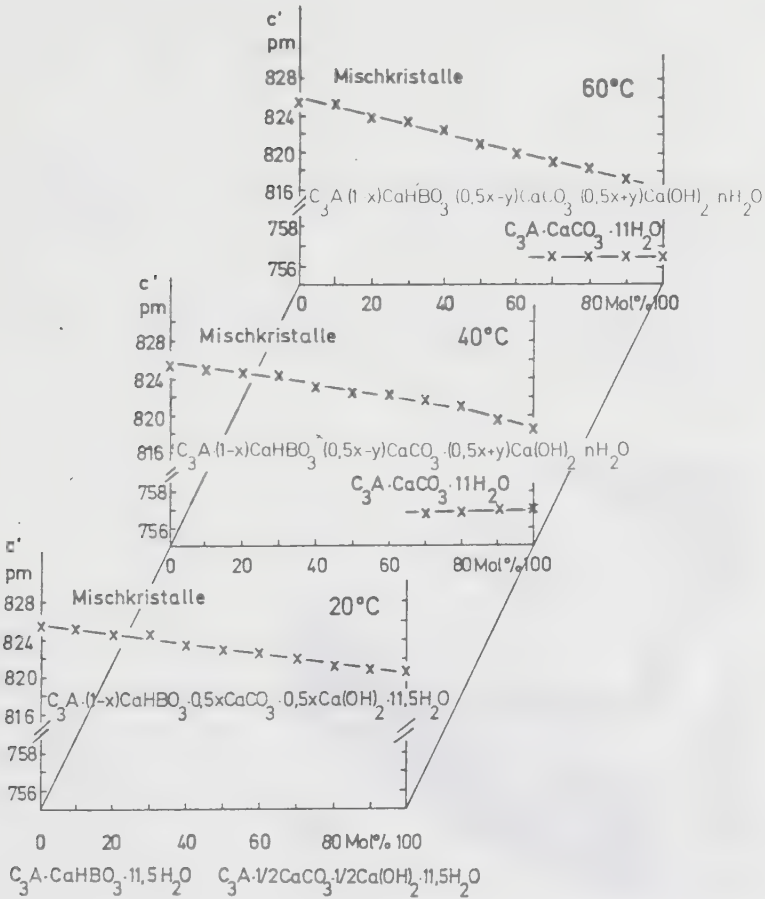


Abb. 65 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$ bei 20, 40 und 60°C und 35 % r.F.

3.1.1.4.4. $C_3A \cdot O, 5CaCO_3 \cdot O, 5Ca(OH)_2 \cdot 11, 5H_2O$ Halbcarbonat

Halbcarbonat spielt als das bei Raumtemperatur und geringem CO_3^{2-} - Angebot stabile Calciumaluminathydrat in den hier untersuchten Systemen eine Rolle.

Von DOSCH und zur STRASSEN (1965) zuerst als "Viertelcarbonat" angesprochen, wurde die Verbindung bei einer Neuuntersuchung des Systems TCAH - Monocarbonat als intermediäre Phase "Halbcarbonat" von FISCHER (1977) und FISCHER und KUZEL (1982) beschrieben. Ihr kommt bezüglich des H_2O - und CO_3^{2-} - Gehaltes eine gewisse Phasenbreite zu, die sich in einer Variationsbreite der Gitterkonstanten c' bzw. c_0 äußert. Bei höheren Temperaturen wird Halbcarbonat in Kontakt mit der Lösung instabil zugunsten von Monocarbonat, C_3AH_6 und CH.

Nach den röntgenographischen Untersuchungen besitzt Halbcarbonat eine rhomboedrische Sechsschichtstruktur mit der Raumgruppe $R \bar{3}c$ bzw. $R \bar{3}c$.

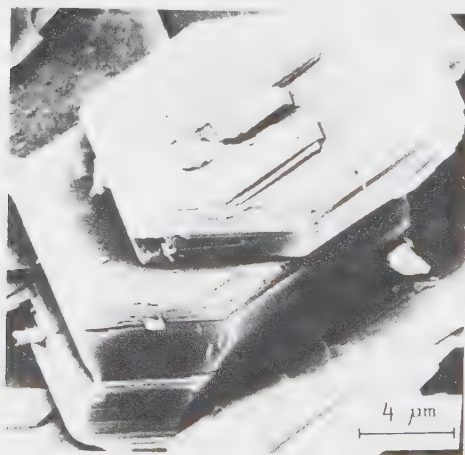


Bild 21 :
Halbcarbonat
 $C_3A \cdot O, 5CaCO_3 \cdot$
 $O, 5Ca(OH)_2 \cdot 11, 5H_2O$
REM - Aufnahme

In der thermischen Analyse ist der Beginn der Entwässerung charakterisiert durch die kontinuierliche Abgabe des ersten locker gebundenen Zwischenschicht - H_2O . Nach Verlust des restlichen Zwischenschichtwassers folgt die Zerstörung der Hauptschicht und ab 600°C die Decarbonatisierung (Abb. 66 und 67). Abb. 68 zeigt die Dehydratation der Zwischenschicht in der Röntgenheizkammer.

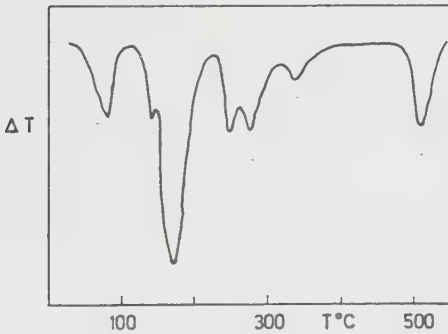


Abb. 66 :
DSC - Aufnahme von
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3$
 $0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
R : $10^\circ/\text{min}$

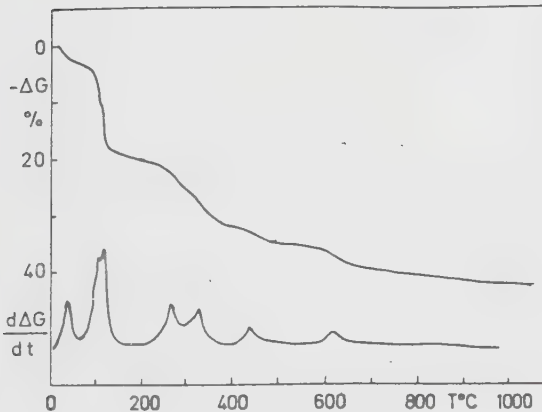


Abb. 67 :
TG - Aufnahme
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3$
 $0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
R : $1^\circ/\text{min}$ (TG)
 $10^\circ/\text{min}$ (DTG)

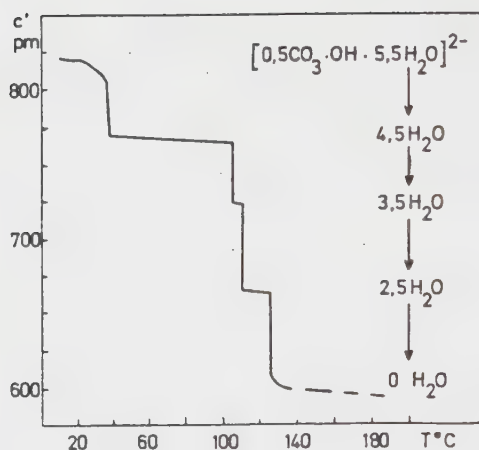


Abb. 68 :
Entwässerung von
 $C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$
in der Röntgen-
heizkammer

Tab. 12 faßt die Ergebnisse der Dehydratationsversuche des Halbcarbonats zusammen.

T °C	Gew.verlust %	Rest H ₂ O ges.	Zwischenschicht	c' pm
20	0	12	OH·0,5CO ₃ ·5,5H ₂ O	820
35	3,4	11	4,5H ₂ O	770
105		10	3,5H ₂ O	730
110	9,9	9	2,5H ₂ O	670
120	17,8	6,5	0 H ₂ O	600
210	22,2	5	Zerstörung der	röntgen-
240	25,9	4	Hauptschicht	amorph
460	32,4		Entwässerung und Decarbonatisierung	
1100	42,6			

Tab. 12 : Entwässerung von $C_3A \cdot 0,5CaCO_3 \cdot 0,5Ca(OH)_2 \cdot 11,5H_2O$

Im IR - Spektrum von Halbcarbonat weisen Banden bei 3600 cm^{-1} auf Wasserstoffbrücken hin. Die Aufspaltung der $\nu_1\text{-CO}_3$ - Schwingung im Ramanspektrum läßt auf eine mögliche Symmetrierniedrigung zu einer Untergruppe von D_{3h} schließen.

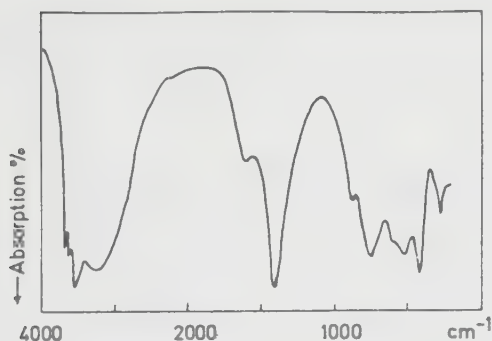


Abb. 69 :

IR - Spektrum von

$\text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3$.

$0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

Wellenzahl cm^{-1}		Zuordnung
IR	Raman	
3690	3700	OH (Hauptschicht)
3660		$\text{H}_2\text{O } \nu_1/\nu_3$ (Zwischenschicht)
3570	3550	$\text{H}_2\text{O } \nu_1/\nu_3$ "
3400-2800		H_2O
1620		$\text{H}_2\text{O } \nu_2$
1395		$\text{CO}_3 \nu_3$
	1085	$\text{CO}_3 \nu_1$
	1066	$\text{CO}_3 \nu_1$
880		$\text{CO}_3 \nu_2$
775		$\text{Al}(\text{OH})_6$
575-530	535	AlO_6
420		Ca-O
290		Ca-O

Tab. 13 : Infrarot- und Ramanspektrum von
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
 Ramanspektrum nach FISCHER (1977)

3.1.1.5. System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ - $C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$

Höhere Angebote an CO_2 oder CO_3^{2-} führen bei der Einwirkung auf Calciumaluminathydrate zu Monocarbonat $C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$, das auch bei Temperaturerhöhung als Carbonatträger gegenüber Halbcarbonat begünstigt ist.

Wie im System Halbcarbonat - Monoborat ist auch im vorliegenden System innerhalb des Mischkristallbereiches die röntgenographische Untersuchung zur Symmetriestimmung zu wenig aussagekräftig, so daß optische Methoden herangezogen werden müssen.

Syntheseansätze wurden nach folgender Formel eingewogen:



B_2O_3 wurde als H_3BO_3 , CO_2 als $CaCO_3$, Al_2O_3 als $Al(OH)_3$ bzw. $CaO \cdot Al_2O_3$ eingebracht. Nach drei- bis viermonatiger Reaktionszeit wurden die Proben abfiltriert und untersucht.

3.1.1.5.1. Ergebnisse bei 20°C

Bei 20°C treten im System Monoborat - Monocarbonat bis < 100 Mol % Monocarbonat Mischkristalle mit HBO_3^{2-} - und CO_3^{2-} - Gruppen in der Zwischenschicht auf. Der Schichtabstand c' fällt mit zunehmendem CO_3^{2-} - Gehalt um 6 pm, während a_0 bzw. b_0 konstant bleiben. Mit dem Auftreten der Endkomponente $C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ ab circa 70 Mol % Monocarbonat nehmen die Grenzmischkristalle mit gleichbleibenden Gitterkonstanten mengenmäßig ab.

Im feuchten Zustand liegen als Folge der schwachen Bindung des Zwischenschichtwassers die Werte für c_0 um ca. 5-7 pm höher als bei 35 % r.F.

Die Symmetrie der Mischkristalle ändert sich bei 33 Mol % Monocarbonat von der monoklinen Zweischichtstruktur zu der rhomboedrischen Sechsschichtstruktur.

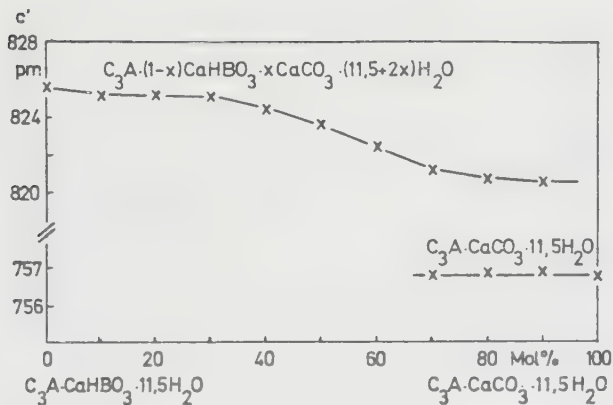


Abb. 70 : Schichtdicke c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ bei $20^\circ C$ und 100 % r.F.

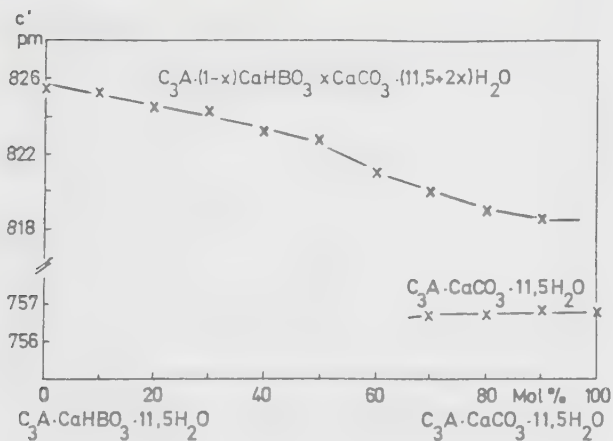


Abb. 71 : Schichtdicke c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ bei $20^\circ C$ und 35 % r.F.

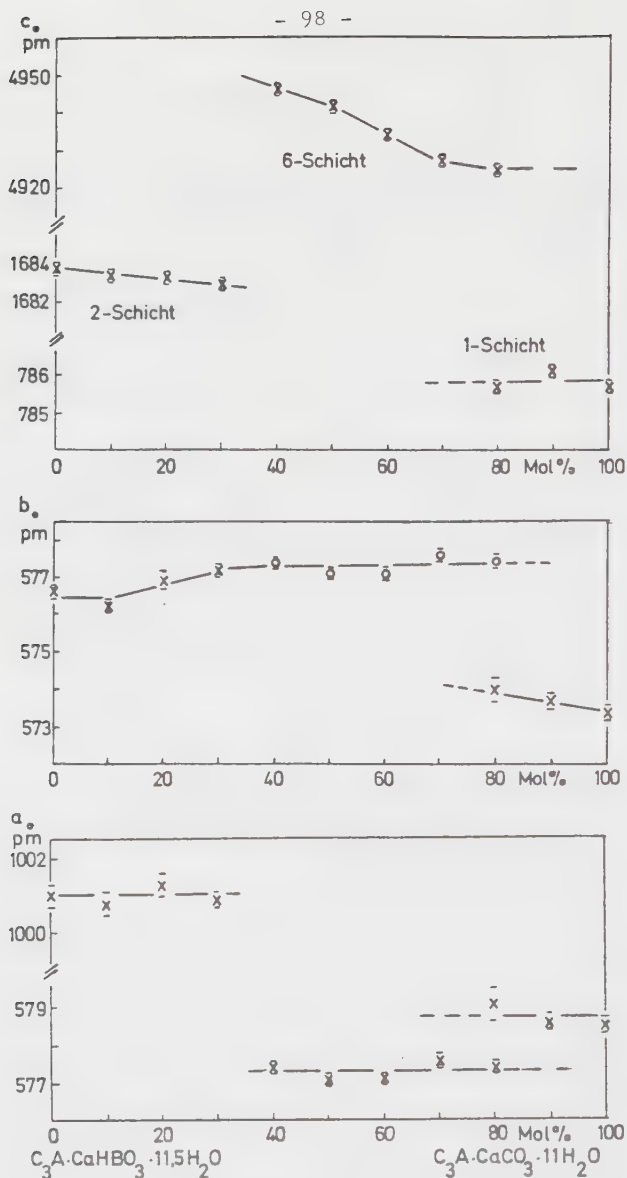


Abb. 72 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$
 bei 20°C und 100 % r.F.

$b_o = a_o$ der rhomboedr. Mischkristalle zum
 Vergleich mit eingetragen (o)

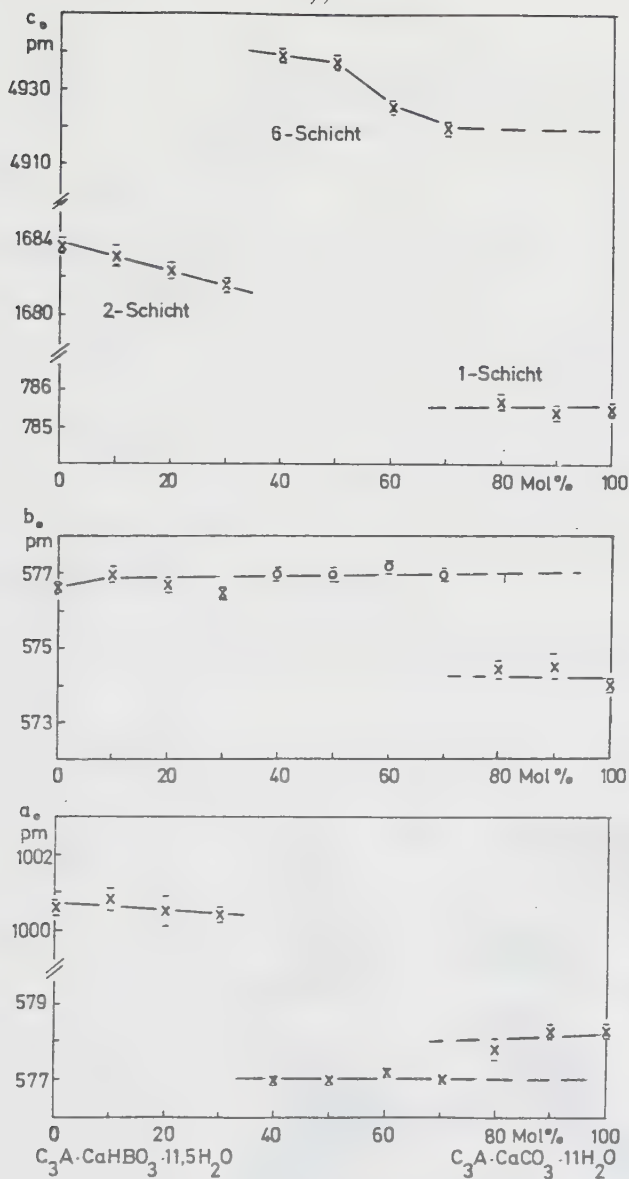


Abb. 73 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$
 bei 20°C und 35 % r.F.

$b_o = a_o$ der rhomboedr. Mischkristalle zum
 Vergleich mit angegeben (o)

Nach der chemischen und thermischen Analyse kommt den Mischkristallen die Zusammensetzung zu:

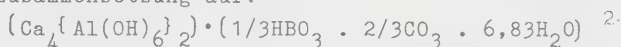


In struktureller Schreibweise entspricht dies:



Die Gitterkonstanten der Mischkristalle nehmen in Stapelrichtung c_0 ab, obwohl der H_2O - Gehalt der Zwischenschicht zunimmt. Die überzähligen H_2O können offenbar in Lücken der Zwischenschicht eingelagert werden, ohne die Struktur deutlich zu beeinflussen.

Der neben Monocarbonat beständige Grenzmischkristall weist die Zusammensetzung auf:



während an der Sprungstelle der Symmetrie folgende Zwischenschicht vorliegt:



Ein Vergleich mit dem System Monoborat - Halbcarbonat zeigt die Symmetrieänderung bei der gleichen Besetzung der Zwischenschicht durch HBO_3^{2-} :

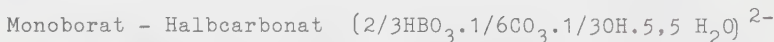


Bild 22 :

Mischkristalle im System



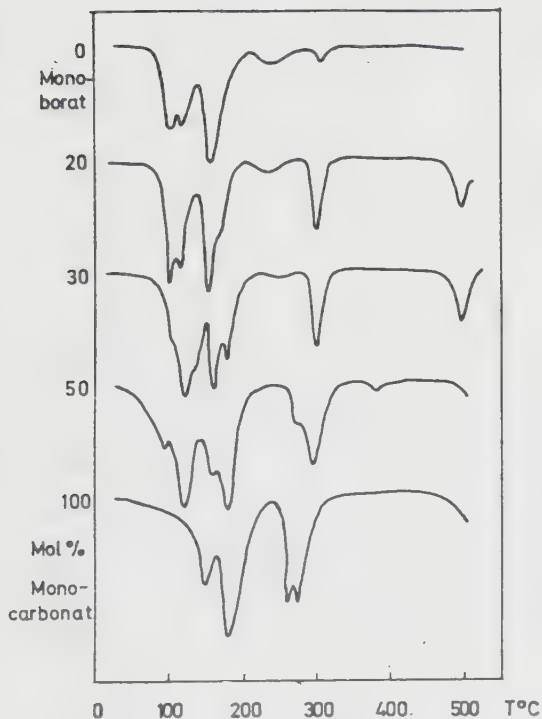


Abb. 74 :

DSC - Aufnahmen
im System



bei 20°C

R : 10°/min

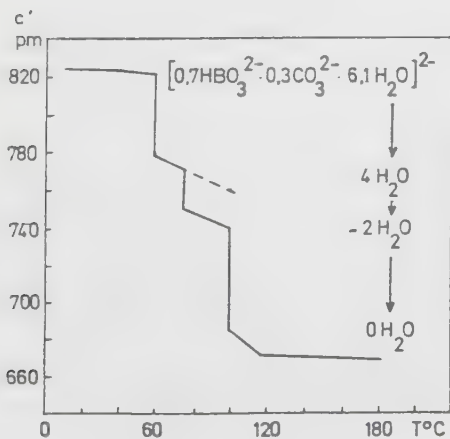
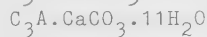


Abb. 75 :

Entwässerung eines
Mischkristalls ($x=0,3$)
im System



in der Röntgen-
heizkammer

T °C	Zwischenschicht (x=0,3)	c' pm
20	0,7HBO ₃ ·0,3CO ₃ ·6,1H ₂ O	824
60	4 H ₂ O	779
77	2 H ₂ O	750
100	0 H ₂ O	684 - 670
ab 180	Zerstörung der Hauptschicht	-

Tab. 14 : Entwässerungsverhalten der Mischkristalle im System C₃A.CaHBO₃·11,5H₂O - C₃A.CaCO₃·11H₂O

Das thermische Verhalten im vorliegenden System ähnelt dem im System Monoborat - Halbcarbonat. Mit steigendem CO₃²⁻ - Gehalt verlagern sich beide Entwässerungsstufen zu höheren Temperaturen (Abb. 74).

Als Beispiel für die Entwässerung ist die Dehydratation eines Mischkristalls (x=0,3) in der Röntgenheizkammer wiedergegeben (Abb. 75).

Tab. 14 faßt die Entwässerung der Mischkristalle zusammen. Mit den Ergebnissen läßt sich der Austausch in den Mischkristallen des Systems formulieren:



3.1.1.5.2. Ergebnisse bei 40°C

Die Gitterkonstanten der Mischkristalle im System Monoborat - Monocarbonat verlaufen bei 40°C ähnlich wie bei 20°C. Ab 20 Mol % tritt die Endkomponente C₃A.CaCO₃·11H₂O in steigendem Maße dazu. Eine Abschätzung der Mengen anhand der relativen Intensitäten des 001 - Peaks ergibt bei 70 Mol % Monocarbonat ein Verhältnis Mischkristall/ Monocarbonat von ca. 1. C₃AH₆ und CH werden nicht beobachtet.

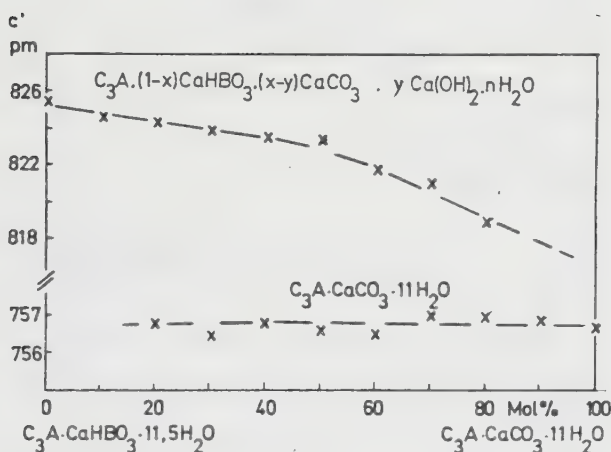


Abb. 76 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ bei $40^\circ C$ und 100 % r.F.

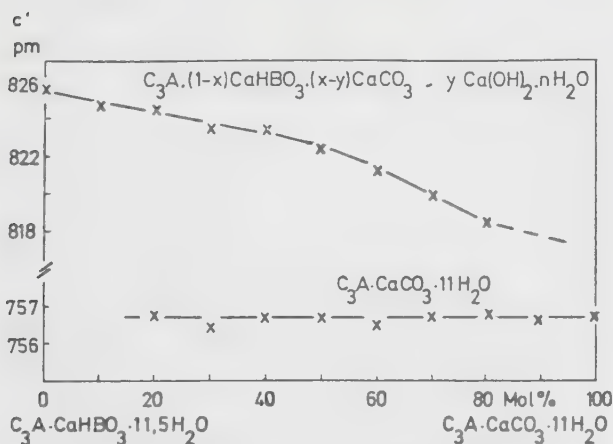


Abb. 77 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ bei $40^\circ C$ und 35 % r.F.

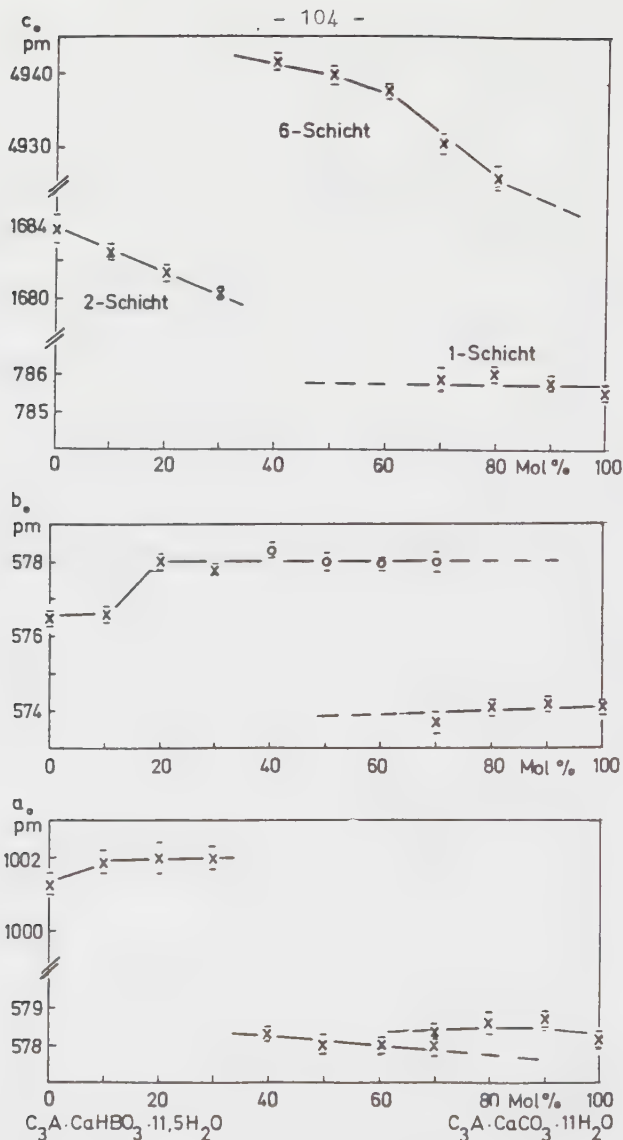


Abb. 78 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11.5H_2O - C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$
 bei 40°C und 100 % r.F.

$b_0 = a_0$ der rhomboedr. Mischkristalle zum
 Vergleich mit angegeben (o)

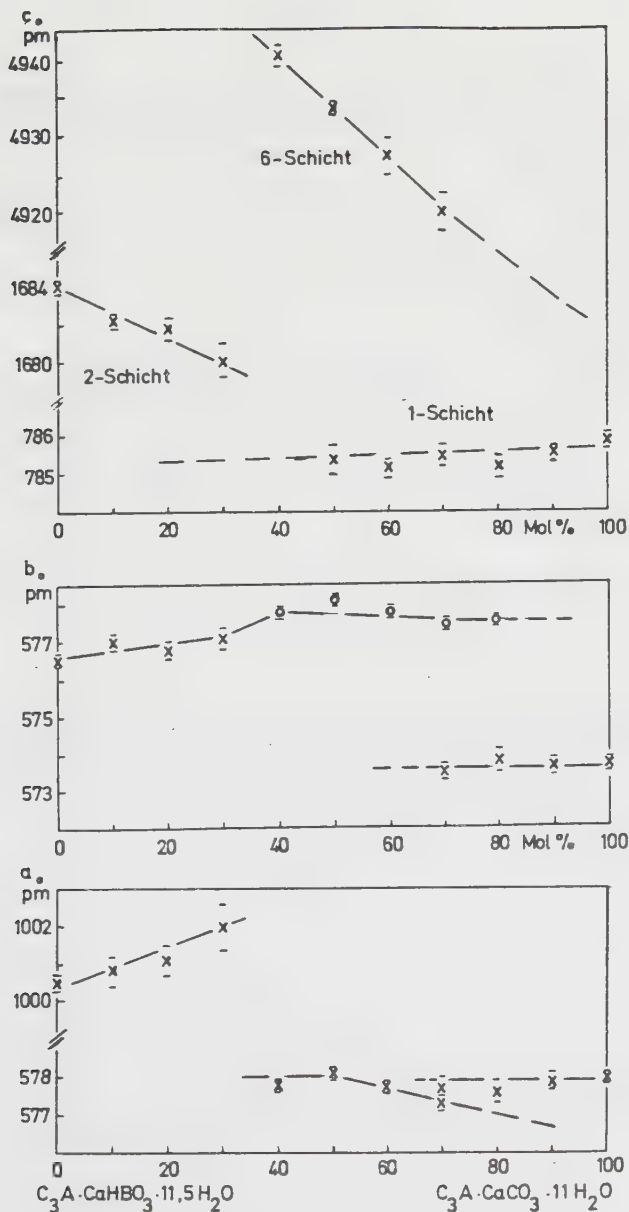


Abb. 79 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$
 bei 40°C und 35 % r.F.
 $b'_0 = a_0$ der rhomboedrischen Mischkristalle zum Vergleich mit angegeben (o)

Das verstärkte Auftreten von Monocarbonat bei höheren Temperaturen hat die Bindung eines Teils der CO_3^{2-} - Anionen zur Folge, die dem Mischkristall nicht mehr zur Verfügung stehen. Zum Ladungsausgleich werden OH^- - Anionen eingebaut. Die exakte Zusammensetzung der Mischkristalle kann damit nur mit Kenntnis des Dreistoffsystems $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot \text{nH}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ angegeben werden.

Mit den bis jetzt vorhandenen Kenntnissen kann nur eine allgemeine Zusammensetzung formuliert werden:



3.1.1.5.3. Ergebnisse bei 60°C

Im System Monoborat - Monocarbonat bei 60°C tritt die Endkomponente $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$ bereits bei 20 Mol % Monocarbonat neben den Mischkristallen auf (Abb. 82 und 83). Als Konsequenz ist, wie bei 40°C, nur eine pauschale Zusammensetzung der Mischkristalle anzugeben:



C_3AH_6 und CH treten nur in vernachlässigbar geringen Mengen auf. Die Symmetrieänderung von monoklin nach rhomboedrisch liegt, wie bei den anderen Temperaturen, bei 33 Mol % Monocarbonat. Auch im Verlauf der Gitterkonstanten zeigen sich keine wesentlichen Unterschiede zum System bei 40°C (Abb. 84 und 85).

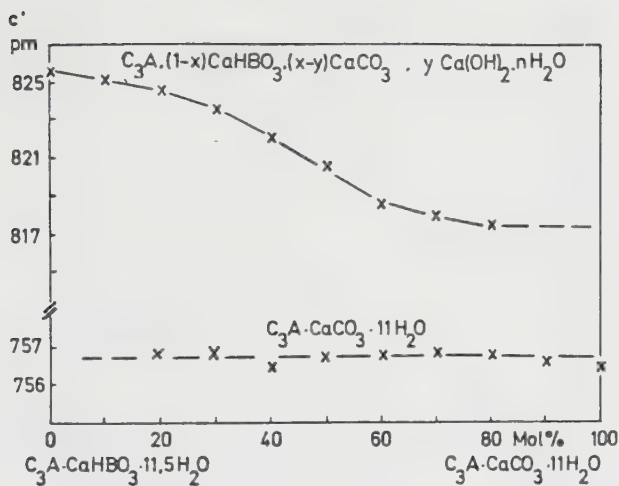


Abb. 80 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ bei $60^\circ C$ und 100 % r.F.

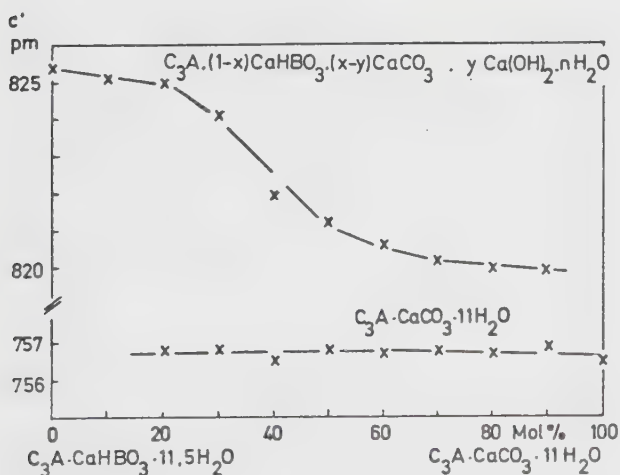


Abb. 81 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ bei $60^\circ C$ und 35 % r.F.

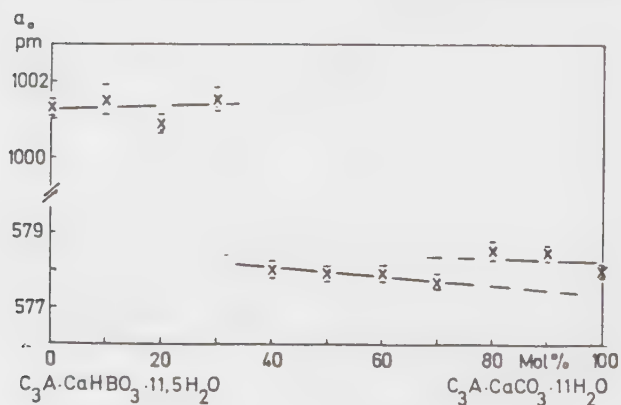
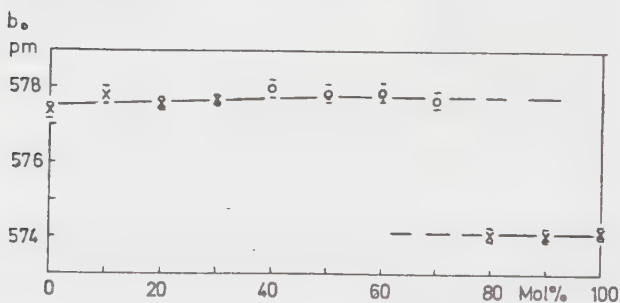
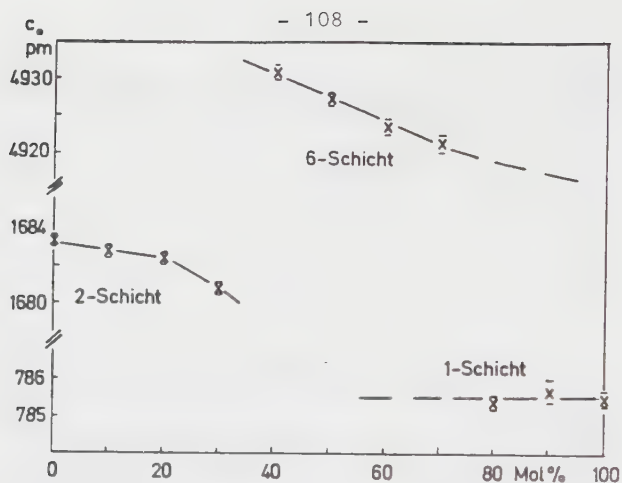


Abb. 82 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11.5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$ bei 60°C und 100 % r.F.
 $b_o = a_o$ der rhomboedr. Mischkristalle zum Vergleich mit angegeben (o)

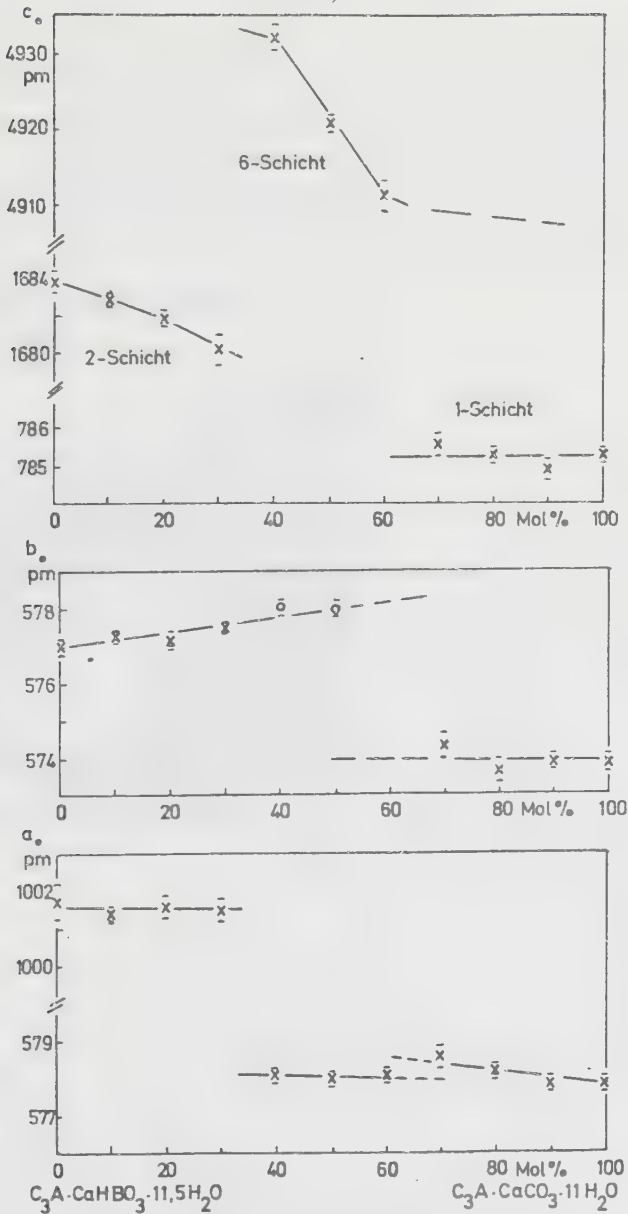


Abb. 83 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$
 bei 60°C und 35 % r.F.

$b_0 = a_0$ der rhomboedr. Mischkristalle zum Vergleich mit angegeben (o)

Abb. 84 stellt die Ergebnisse im System Monoborat - Monocarbonat bei drei Temperaturen zusammen. Man erkennt, wie mit zunehmender Temperatur sich das Stabilitätsfeld von Monocarbonat ausweitet und deshalb die Zusammensetzung der Mischkristalle ins Dreistoffsystem $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot nH_2O$ - $C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ - $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ verlagert wird.

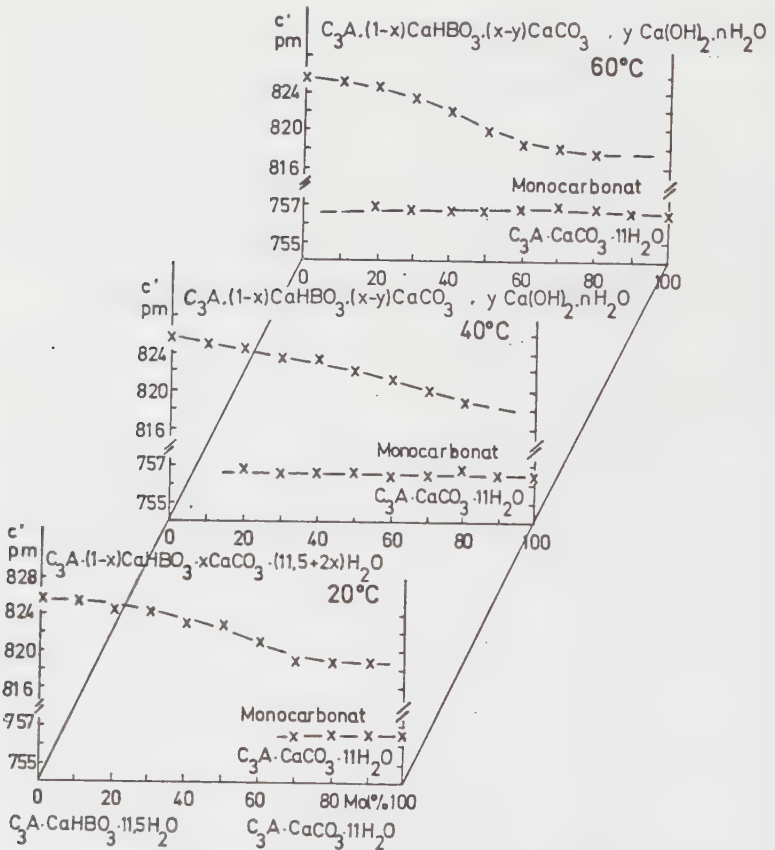


Abb. 84 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ - $C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ bei 20, 40 und 60°C und 35 % r.F.

3.1.1.5.4. $C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ Monocarbonat

Monocarbonat $C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$ ist das stabilste carbonathaltige Calciumaluminathydrat. Von FISCHER (1977) und FISCHER und KUZEL (1982) wurde es als Endkomponente des Systems TCAH - Monocarbonat beschrieben. Die Verbindung ist triklin P 1 oder P $\bar{1}$; monokline Symmetrie kann durch Verzwillingung vorgetäuscht werden.



Bild 23 :
Monocarbonat
 $C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$
langgestreckter
Kristall
REM - Aufnahme

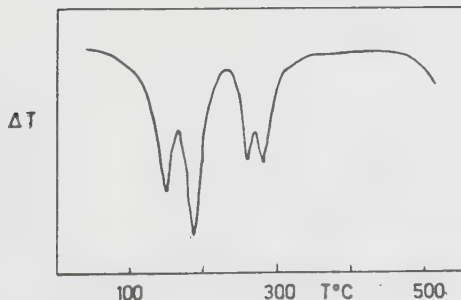


Abb. 86 :
DSC - Aufnahme
von Monocarbonat
R : $10^\circ/min$

In REM - Aufnahmen können Monocarbonatkristalle sicher von anderen Calciumaluminathydraten durch die langgestreckte Form unterschieden werden (Bild 23).

Wie die Abb. 86 - 88 zeigen, werden die H_2O der Zwischenschicht bis ca. $150^{\circ}C$ in zwei Stufen abgegeben. Die zweite Stufe leitet bereits in die Zerstörung der Hauptschicht über.

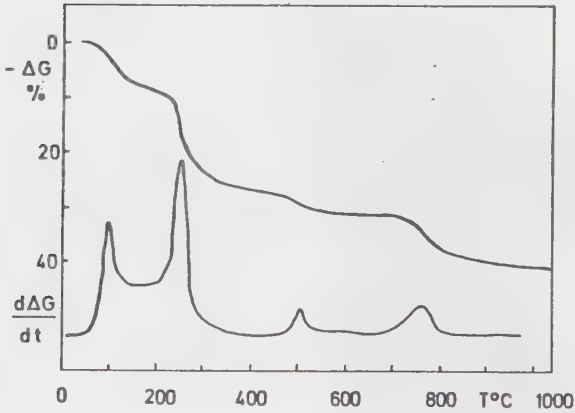


Abb. 86 :
TG - Aufnahme
von Monocarbonat
R : $1^{\circ}/\text{min}$ (TG)
 $10^{\circ}/\text{min}$ (DTG)

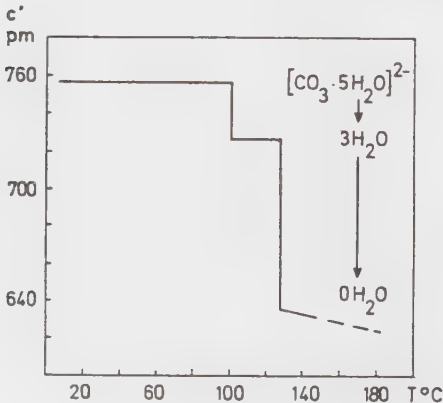


Abb. 87 :
Entwässerung von
 $C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$
in der Röntgen-
heizkammer

Die Ergebnisse der Entwässerungsversuche sind in Tab. 15 zusammengefaßt.

T °C	Gew.verlust %	Rest-H ₂ O ges.	Zwischenschicht	c' pm
20	0	11	CO ₃ · 5H ₂ O	756
100	6,5	9	· 2H ₂ O	721
150	14,7	6	· OH ₂ O	635
230	27	Zerstörung der Hauptschicht		röntgen-
480	31			amorph
750	39,3	Entwässerung und Decarbonatisierung		
1100	41,0			

Tab. 15 : Dehydratation von C₃A.CaCO₃·11H₂O

IR - spektroskopische Aufnahmen zeigen neben starker Differenzierung der Valenzschwingungen von H₂O und OH im Bereich um 3600 cm⁻¹ die Aufspaltung der ν₃-CO₃ Schwingung und das Auftreten der totalsymmetrischen ν₁-CO₃ - Bande. Dafür kann nach FISCHER (1977) neben der Wasserstoffbrückenbindung die Lage der CO₃ - Gruppen auf kristallographisch verschiedenen Punktlagen verantwortlich gemacht werden. ADLER und KERR (1963) geben für den geschilderten Sachverhalt im IR - Spektrum eine Molekülsymmetrie für CO₃²⁻ von höchstens C_{2v} an.

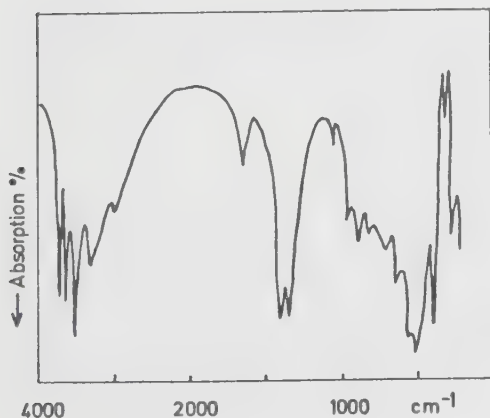


Abb. 88 :
IR - Spektrum von
Monocarbonat

Wellenzahl cm^{-1}		Zuordnung
IR	Raman	
3690	3685	OH (Hauptschicht)
	3671	OH "
3640		OH "
	3625	OH "
3570	3575	H_2O ν_1/ν_3 (Zwischen-
3550	3555	H_2O ν_1/ν_3 schicht)
3380		H_2O ν_1/ν_3
3030		H_2O ν_1/ν_3
1640		H_2O ν_2
1420		CO_3 ν_3
1370		CO_3 ν_3
1070	1067	CO_3 ν_1
880		CO_3 ν_2
820		$\text{Al}(\text{OH})_6$
720		$\text{Al}(\text{OH})_6$
680		$\text{AlO}_6 / \text{CO}_3$ ν_4
580		AlO_6
530	532	AlO_6
425		Ca-O
370		Ca-O
305		Ca-O

Tab. 16 : IR - und Ramanfrequenzen von $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$
Raman nach FISCHER (1977)

3.1.2. ETTRINGITE

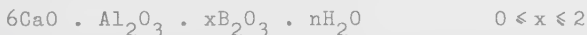
Wie in 2.1 dargelegt, existieren hauptsächlich zwei Möglichkeiten der Darstellung von Ettringiten: einmal der "konventionelle" Weg über die Reaktion von CaO und CA mit den entsprechenden Anionen, zum anderen die Saccharatmethode. Je nach angewandtem Verfahren bilden sich in Gegenwart von $B(OH)_4^-$ - Ionen Ettringite, die sich in ihrem B_2O_3 -Gehalt unterscheiden. Es war daher unumgänglich, die Borat-ettringite und ihr Verhältnis zu den anderen Verbindungen dieses Typs nach beiden Darstellungsmethoden zu untersuchen.

3.1.2.1. Systeme Hydroxidettringit - Boratettringite

3.1.2.1.1. System $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$ - $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O$

Zu Beginn der Untersuchungen stand die Frage der exakten Zusammensetzung des Boratettringits nach der Saccharatmethode im Mittelpunkt. Das System wurde deshalb bis zu einem Molverhältnis $B_2O_3/Al_2O_3 = 2$ untersucht.

Folgende Synthesen wurden eingewogen:



CaO wurde in Saccharatbindung, Al_2O_3 als Na-Aluminatlösung und B_2O_3 als H_3BO_3 oder als $Na_2B_4O_7 \cdot 10H_2O$ eingebracht. Nach 5 - 7 Tagen Standzeit bei $40^\circ C$ wurden die Proben unter Schutzgas abfiltriert und untersucht.

Als Bodenkörper liegen ausschließlich Ettringite mit röntgenographisch hexagonaler Symmetrie vor; entsprechende laminare Verbindungen erscheinen nicht.

Wie Abb. 89 zeigt, bleiben die Gitterkonstanten der Ettringite ab einem Molverhältnis $B_2O_3 / Al_2O_3 = 0,2$ praktisch unverändert; auch die B_2O_3 - Gehalte nehmen nur noch wenig zu.

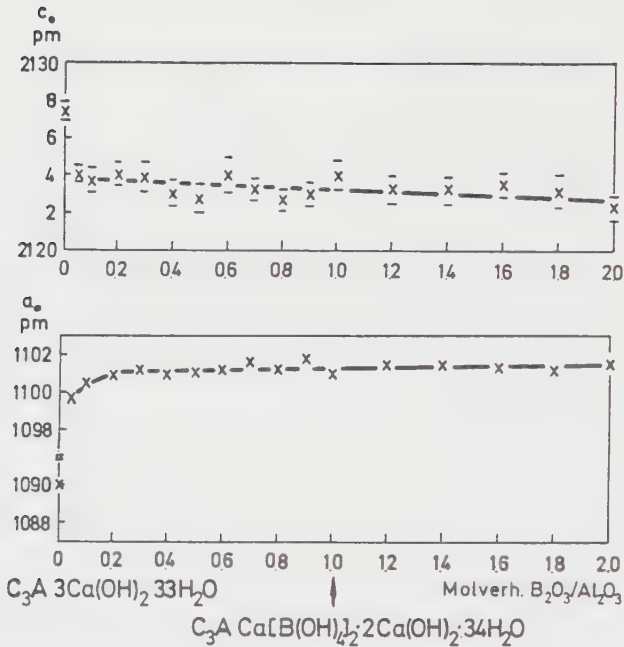


Abb. 89 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O - C_3A \cdot Ca[B(OH)_4]_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O$
 bei $4^\circ C$ (Saccharatmethode)

Die Endkomponente des Systems ist damit bereits bei geringen B_2O_3/Al_2O_3 - Verhältnissen stabil. Die Menge des Präzipitats entspricht dem Anteil des eingewogenen B_2O_3 ; ein Teil des CaO und des Al_2O_3 bleiben in Lösung.

Unterhalb des Molverhältnisses $B_2O_3/Al_2O_3 = 0,2$ fallen die B_2O_3 - Gehalte auf ca. 70 % des Wertes der Endverbindung. Dies bedeutet, daß ungefähr $1/4$ der $B(OH)_4^-$ - Tetraeder in den Hohlräumen der Struktur durch OH^- ersetzt werden können. Möglicherweise geht dieser Ersatz noch weiter, doch überdeckt bei Molverhältnissen $B_2O_3/Al_2O_3 < 0,05$ die Carbonatisierung der Proben alle anderen Effekte.

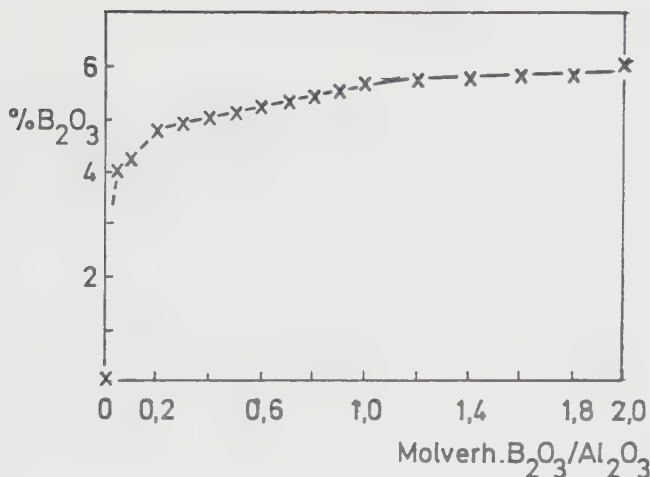


Abb. 90 : B_2O_3 - Gehalte der Ettringite im System
 $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O - C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O$

Die Gitterkonstanten von $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$ unterscheiden sich so deutlich von denen der borathaltigen Ettringite, daß eine durchgehende Mischbarkeit unwahrscheinlich ist. Bei Molverhältnissen > 1 bleibt das überschüssige B_2O_3 in Lösung.

Nach diesen Ergebnissen kommt der borathaltigen Endkomponente des Systems die Zusammensetzung zu:



Das Molverhältnis B_2O_3/Al_2O_3 dieses Ettringits liegt damit bei 1.

3.1.2.1.2. System $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot nH_2O$ -
 $C_3A \cdot 2Ca[B(OH)_4]_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$

Die Untersuchung des Systems $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot nH_2O$ -
 $C_3A \cdot 2Ca[B(OH)_4]_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ sollte Stabilität und Zu-
 sammensetzung des Boratettringits klären, der bereits im
 System TCAH - Monoborat (vgl. 3.1.1.1.) bei hohen B_2O_3 -
 Gehalten aufgetreten war.

Reaktionsansätze der Zusammensetzung



wurden bei Temperaturen von 4 bzw. 20°C vier bis fünf
 Monate belassen. B_2O_3 wurde als H_3BO_3 eingewogen; Al_2O_3
 mußte in Form von feinst gemahlenem $CaO \cdot Al_2O_3$ verwen-
 det werden, da Proben mit Bayerit auch nach 12 Monaten nicht
 durchreagiert hatten.

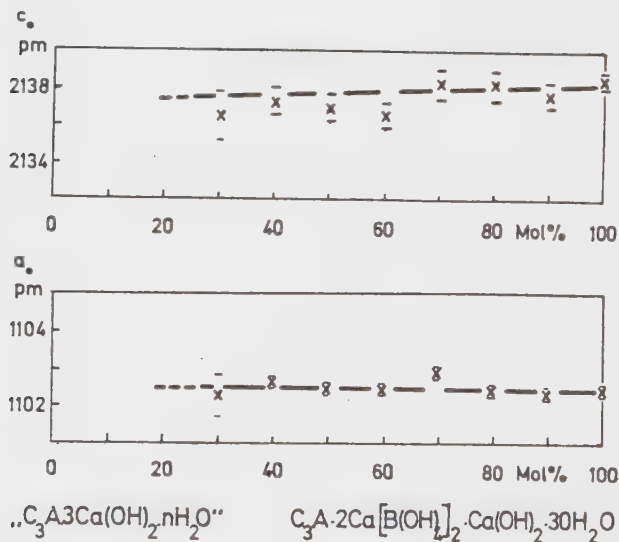


Abb. 91 : Gitterkonstanten der Ettringite im System
 $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot nH_2O$ - $C_3A \cdot 2Ca[B(OH)_4]_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$
 bei 4°C und 35 % r.F.

Aus den Abb. 91 und 92 ist zu ersehen, daß sich die Gitterkonstanten der Ettringite bei 4 bzw. 20°C nur unwesentlich unterscheiden. $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ erscheint bei der 4°C - Synthese ab 20 Mol %, bei dem 20°C - Ansatz bei 30 Mol % mit unveränderten Gitterkonstanten und damit wahrscheinlich gleichbleibender Zusammensetzung. Bei 100 Mol % $\hat{=}$ Molverhältnis $B_2O_3/Al_2O_3 = 2$ gelingt bei beiden Temperaturen die Reindarstellung des Boratettringits. Die Endkomponente $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot nH_2O$ wird bei dieser Art der Darstellung im System nicht stabil, statt dessen werden $C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot nH_2O$ und $Ca(OH)_2$ gebildet. TCAH verschwindet bei 20 Mol %, $Ca(OH)_2$ liegt im gesamten System außer bei 100 Mol % Boratettringit vor. B_2O_3 wird bei geringen Gehalten in $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ gebunden; nach einem Maximum bei 50 Mol % nimmt diese laminare Verbindung zugunsten des Ettringits wieder ab.

Abb. 93 gibt eine Übersicht über die im System auftretenden Verbindungen.

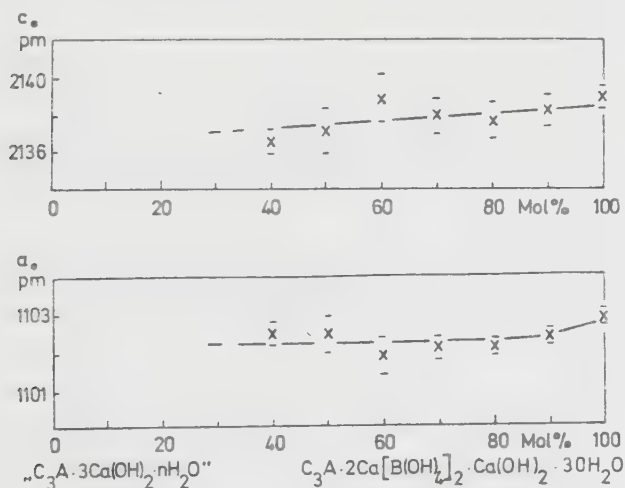


Abb. 92 : Gitterkonstanten der Ettringite im System $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot nH_2O - C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ bei 20°C und 35 % r.F.

Ein Vergleich der Peakintensitäten, normiert auf 1, erlaubt eine Abschätzung der relativen Mengenanteile. Aussagen über einen möglichen Ersatz von $\text{B}(\text{OH})_4^-$ durch OH^- sind wegen der anderen im System auftretenden Verbindungen nicht mit Sicherheit zu treffen. Der zur Abszisse annähernd parallele Verlauf der Gitterkonstanten läßt jedoch keinen oder nur einen sehr geringen Austausch annehmen.

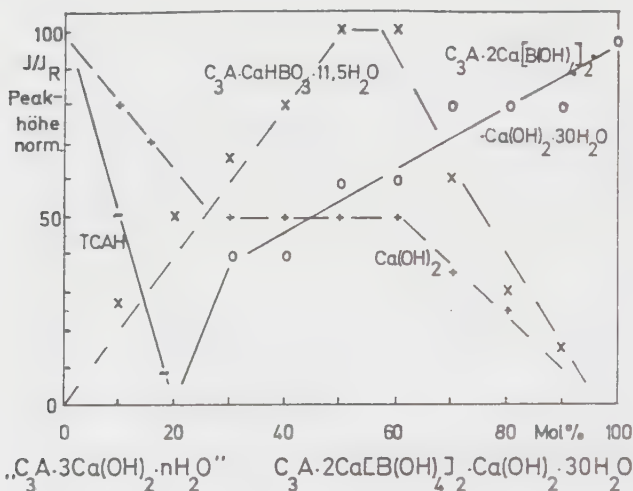


Abb. 93 : Verbindungen im System $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ - $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$ bei 20°C

3.1.2.1.3. Untersuchung von $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 33\text{H}_2\text{O}$

Die Existenz eines Ettringits mit OH^- in den Hohlräumen der Struktur wurde schon früh vermutet (FLINT und WELLS 1944). Spätere Autoren halten die so dargestellten Verbindungen für carbonathaltigen Ettringit, vor allem, da

keine Vorkehrungen gegen Carbonatisierung getroffen worden waren (CARLSON und BERMAN 1960, TAYLOR 1964, LEA 1970).

In dieser Arbeit bildet Hydroxidtettringit die Endkomponente mehrerer Systeme; daher sollte versucht werden, genauere Aussagen zu erhalten.

Die Darstellung des $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot nH_2O$ gelang in dieser Untersuchung nur nach der Saccharatmethode. Bedingt durch die hohe Carbonatempfindlichkeit, mußte besonders gründlich auf den Ausschluß von Luft - CO_2 geachtet werden. Während der Reaktionszeit (maximal 8 Tage) wurden die PE - Flaschen in Behältern mit Natronkalk aufbewahrt. Die Proben wurden in CO_2 - freier Atmosphäre abfiltriert, vorsichtig mit Aceton getrocknet und dann in der Klimakammer geröntgt. Selbst unter diesen Vorsichtsmaßnahmen zeigt sich - bei verschlossener Klimakammer - mit der Zeit eine deutliche Veränderung der Gitterkonstanten zum Carbonatettringit hin (Abb. 94 und Tab. 17).

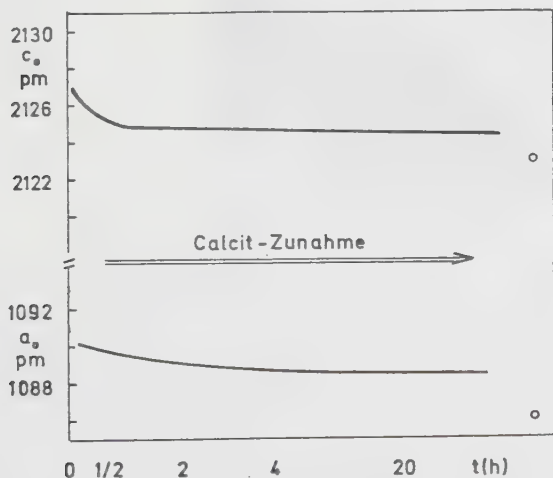


Abb. 94 : Carbonatisierung von $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$ in der verschlossenen Klimakammer
zum Vergleich : $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$ (o)

t in h	Gitterkonstanten	
0	a_o : 1090.0 +- 1 pm	c_o : 2127.4 +- 4 pm
0,5	a_o : 1090.3 +- 6 pm	c_o : 2124.9 +-17 pm
2	a_o : 1089.1 +- 4 pm	c_o : 2124.9 +-14 pm
4	a_o : 1088.8 +- 5 pm	c_o : 2124.7 +-10 pm
20	a_o : 1088.6 +- 5 pm	c_o : 2123.0 +- 9 pm
$C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$	a_o : 1085.5 +- 2 pm	c_o : 2123.0 +- 9 pm

Tab. 17 : Carbonatisierung von $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$

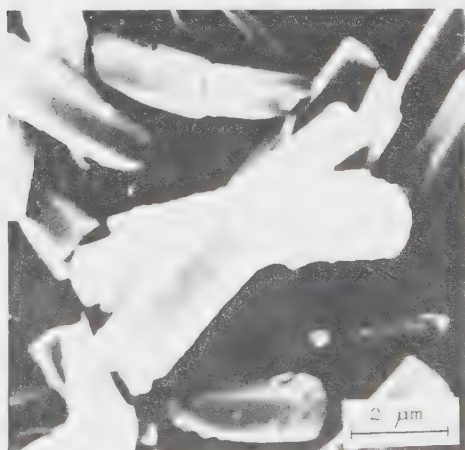


Bild 24 :
 $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$
 REM - Aufnahme

Dies bedeutet, daß auch bei den unter Schutzgas untersuchten Proben von $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$ mit einem unvermeidlichen Carbonatanteil gerechnet werden muß, der zwar klein gehalten, aber nie ausgeschlossen werden kann.

Vor allem in der spektroskopischen Untersuchung (Abb. 95 und Tab. 18) zeigen sich die Effekte der Carbonatisierung. Hier kommt auch noch die CO_2 - Kontamination während der Präparation hinzu.

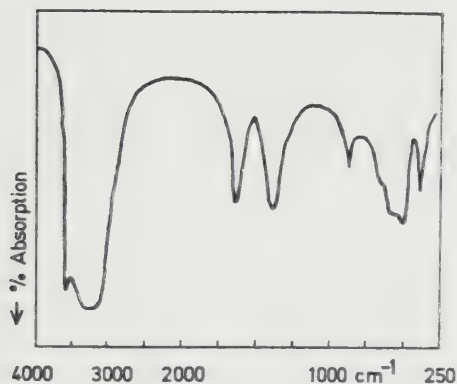


Abb. 95 :
IR - Spektrum von
 $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$
(carbonatisiert)

Wellenzahl cm^{-1}	Zuordnung
3620	OH - Valenz
3600-3100	H_2O v_1/v_3
1660	H_2O v_3
1420	CO_3 v_3 (Carbonatisierung)
880	CO_3 v_2 "
650-530	$Al(OH)_6$, AlO_6
425	Ca-O
295	Ca-O

Tab. 18 : IR - Frequenzen von $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$

Im Unterschied zu $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$ taucht die im IR - Spektrum verbotene totalsymmetrische v_1-CO_3 -Schwingung nicht auf. Für die v_3-CO_3 -Bande ist neben carbonatisiertem Hydroxidtettringit auch die Calcitbildung verantwortlich. Unterschiede zum Carbonatettringit bestehen vor allem hinsichtlich der Stabilität. Während $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$ nach fünftägigem Stehen unter Silicagel strukturnotwendige H_2O abgegeben hat, bleibt $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$ stabil.

Wie die thermischen Untersuchungen zeigen, beginnt die Dehydratation mit einer kleinen Stufe, die der teilweisen Abgabe locker gebundener H_2O in den Kanälen entspricht. Der große endotherme Peak ist dem Verlust der Gerüst - H_2O zuzuordnen. Die OH^- - Anionen der Säulen werden erst bei höheren Temperaturen abgegeben.

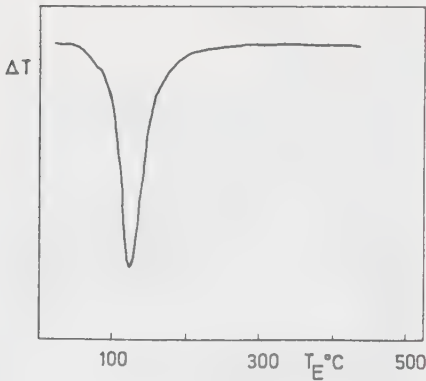


Abb. 96 :
DSC - Aufnahme von
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 33\text{H}_2\text{O}$
R : $10^\circ/\text{min}$
Atmosphäre : N_2

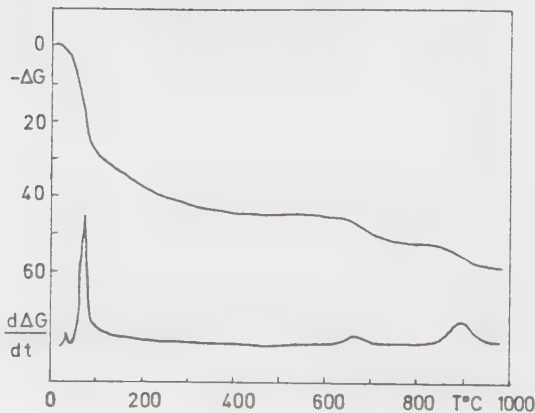


Abb. 97 :
TG - Aufnahme von
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 33\text{H}_2\text{O}$
R : $1^\circ/\text{min}$ (TG)
 $10^\circ/\text{min}$ (DTG)

T°C	Gew.verlust %	H ₂ O Verlust (ges.)
20	0	0
35	2,4	1,5
70	37,2	22,5
kont. bis		
450	45,3	27
720	53,4	32
910	59,2	36

Tab. 19 : Entwässerung von $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$

Nach der chemischen Analyse ergibt sich folgende Oxidformel:



Unter Berücksichtigung der Kristallchemie errechnet sich die Strukturformel:



	Gew. %	Gew. %
	gem.	ber.
CaO	31,4	30,9
Al ₂ O ₃	9,4	9,4
H ₂ O	59,2	59,7
	100,0	100,0

Tab. 20 : chemische Analyse von $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$

3.1.2.1.4. Untersuchung von $C_3A.Ca\{B(OH)_4\}_2.2Ca(OH)_2.36H_2O$

Der nach der Saccharatmethode dargestellte Boratettringit $C_3A.Ca\{B(OH)_4\}_2.2Ca(OH)_2.36H_2O$ mit einem Molverhältnis $B_2O_3/Al_2O_3 = 1$ wurde eingehend untersucht.

REM - Aufnahmen zeigen gedrungene hexagonale Prismen mit leicht gerundeten Endflächen. Letztere sind auf eine Kombination von Pyramide und Basispinakoid zurückzuführen (Bild 25 und 26).

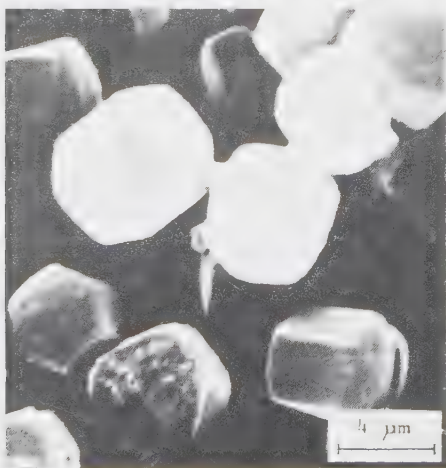
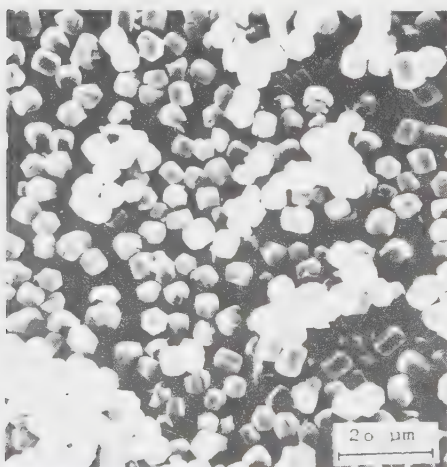
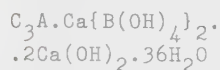


Bild 25 und 26 :

Boratettringit



REM - Aufnahmen

Nach den Röntgenaufnahmen kommt der Verbindung wie den anderen Ettringiten hexagonale oder trigonale Symmetrie zu. Bandenaufspaltungen im IR - Spektrum deuten allerdings auf eine Symmetrierniedrigung hin.

Die chemische Analyse (Tab. 21) ordnet der Verbindung die Oxidformel $6\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{B}_2\text{O}_3 \cdot 42\text{H}_2\text{O}$ zu.

	Gew. % gem.	Gew. % ber.
CaO	27,1	27,0
Al_2O_3	7,9	8,2
B_2O_3	5,7	5,6
H_2O	60,8	59,2
Na_2O	< 0,05	0
	101,5	100,0

Tab. 21 : chemische Analyse von $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}\{\text{B}(\text{OH})_4\}_2 \cdot 2\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 36\text{H}_2\text{O}$

Der H_2O - Gehalt der Verbindung differiert je nach Luftfeuchte; darin könnte auch die Ursache für den etwas zu hohen H_2O - Wert liegen.

Unter Verwendung der spektroskopischen Ergebnisse erhält der Ettringit die Strukturformel:



Die Thermoanalyse zeigt den starken Peak, der die Abgabe der Gerüst - H_2O repräsentiert. Abhängig von der Vorbehandlung, findet sich davor eine kleine Stufe, die von den locker gebundenen H_2O der Hohlräume herrührt. Diese Stufe wird teilweise von dem großen Peak überlagert. Die Hydroxylgruppen aus Kanälen und Gerüst werden bei höheren Temperaturen abgegeben.

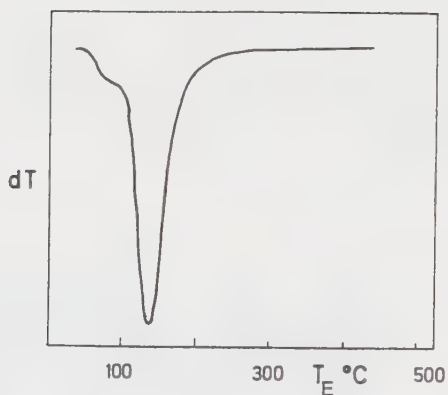
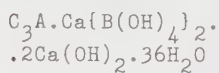


Abb. 98 :

DSC - Aufnahme von



R : 10°/min

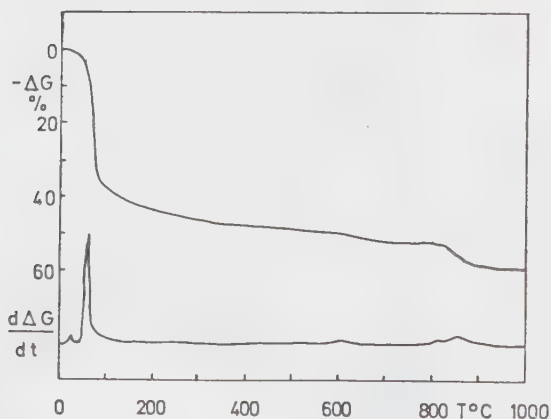
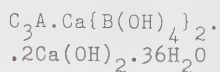


Abb. 99 :

TG - Aufnahme von



R : 1°/min (TG)

10°/min (DTG)

Die spektroskopische Untersuchung erbringt den Beweis für das Vorliegen von $\text{B}(\text{OH})_4$ - Tetraedern durch die Existenz der $\nu_3\text{-B}(\text{OH})_4$ - Schwingung. Auch B-OH - Schwingungen treten auf.

T°C	Gew.verlust %	H ₂ O Verlust (ges.)
20	0	0
35	2,8	2
75	41,2	28
kont. bis		
550	49,9	34
650	52,6	36
840	56,3	38
875	60,8	42

Tab. 22 : Entwässerung von $C_3A.Ca\{B(OH)_4\}_2.2Ca(OH)_2.36H_2O$

Bei fast allen nach der Saccharatmethode dargestellten Ettringiten erscheinen durch die offenbar unvermeidliche Carbonatisierung während der IR - Präparation CO_3 - Schwingungen. Es kann nicht mit Sicherheit ausgeschlossen werden, daß auch BO_3 - Gruppen beteiligt sein könnten. Die ν_3 - BO_3 Bande fällt praktisch mit der ν_3 - CO_3 - Schwingung zusammen, die ν_2 - und ν_4 - BO_3 liegen im Bereich der AlO_6 - Frequenzen und eine mögliche ν_1 - BO_3 - Schwingung liegt exakt an der Stelle der ν_2 - CO_3 . In Ramanspektren, die zur Klärung des Problems beitragen könnten, überdeckt die Fluoreszenz alle Peaks.

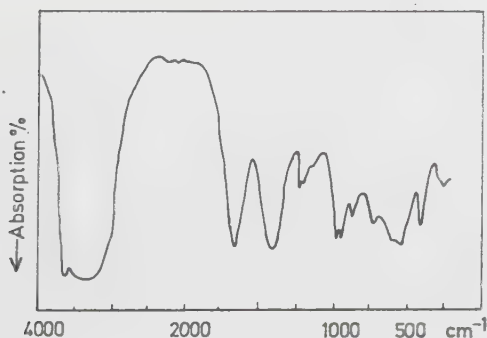


Abb. 100 :
IR - Spektrum von
 $C_3A.Ca\{B(OH)_4\}_2.$
 $.2Ca(OH)_2.36H_2O$

Die Wahrscheinlichkeit für das gleichzeitige Vorliegen von B(OH)_4^- - und BO_3^{3-} - Gruppen ist jedoch nicht sehr groß, da nach dem bisherigen Wissensstand in den Ettringiten die Koordinationszahl vier für die Anionengruppe bevorzugt wird. Charlesit und Sturmanit enthalten ebenfalls B(OH)_4^- - Gruppen (DUNN et al. 1983 / PEACOR et al. 1983).

Wellenzahl cm^{-1}	Zuordnung
3620	OH Valenz
3600-3300	H_2O ν_1/ν_3
1665	H_2O ν_2
1420	CO_3 ν_3 (Carbonatisierung)
1220	B-OH
980	B(OH)_4 ν_3
950	B(OH)_4 ν_3
880	CO_3 ν_2
720	Al(OH)_6
550	AlO_6 / B(OH)_4 ν_4
425	Ca-O
300	Ca-O

Tab. 23 : IR - Frequenzen von $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}\{\text{B(OH)}_4\}_2 \cdot 2\text{Ca(OH)}_2 \cdot 36\text{H}_2\text{O}$

3.1.2.1.5. Untersuchung von $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}\{\text{B(OH)}_4\}_2 \cdot \text{Ca(OH)}_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$

Der Boratettringit $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}\{\text{B(OH)}_4\}_2 \cdot \text{Ca(OH)}_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$, der auf konventionellem Weg durch Reaktion von CaO, CA und H_3BO_3 mit Wasser dargestellt wird, unterscheidet sich von dem nach der Saccharatmethode erhaltenen Ettringit durch seinen doppelt so hohen B_2O_3 - Gehalt.

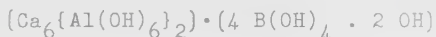
Auch nach langen Reaktionszeiten sind die Kristalle noch sehr klein. Ihr Habitus ist prismatisch; das Exemplar in Bild 27 zeigt offensichtlich Zwillingsbildung.



Bild 27 :
 $C_3A \cdot 2Ca B(OH)_4 \cdot 2 \cdot$
 $\cdot Ca(OH)_2 \cdot 39H_2O$
 REM - Aufnahme

Die Verbindung kann, wie die anderen Ettringite, hexagonal bzw. trigonal indiziert werden.

Aus der chemischen Analyse (Tab. 24) läßt sich die Oxidformel $6CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 2B_2O_3 \cdot 39H_2O$ ableiten. Damit kann folgende Strukturformel angenommen werden:



	Gew. % gem.	Gew. % ber.
CaO	26,1	26,3
Al ₂ O ₃	7,1	8,0
B ₂ O ₃	11,1	10,9
H ₂ O	54,0	54,8
	98,3	100,0

Tab. 24 : chemische Analyse von $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 39H_2O$

Das Vorliegen von $B(OH)_4^-$ - Tetraedern kann aus den Schwingungsspektren aufgrund der Existenz der Banden $\nu_3-B(OH)_4^-$ und B-OH geschlossen werden. Wie bereits im Fall des Ettringits $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O$ gezeigt, läßt sich die kleine ν_3-CO_3 - Bande auf Carbonatisierung während der Präparation zurückzuführen. Die Zuordnung zu einer $\nu_3-BO_3^{3-}$ ist unwahrscheinlich, da bis auf $Fe(CN)_6^{3-}$ (BUHLERT 1971) keine dreifach geladenen Anionen in Ettringiten bekannt sind. Auch ist nicht zu erwarten, daß bei Vorliegen von Wasserstoffbrücken über die $B(OH)_4^-$ - Tetraeder isolierte BO_3^{3-} stabil sind.

Im Ramanspektrum liegt die Schwingung $\nu_3-B(OH)_4^-$ ca. 20 cm^{-1} niedriger als im IR - Spektrum; eine Aufspaltung dieser Schwingung ist daher anzunehmen, auch wenn sie im Infraroten nicht aufgelöst werden kann.

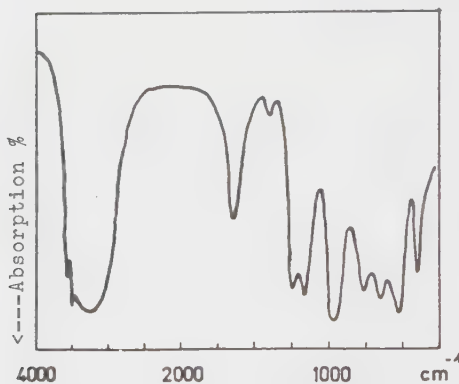


Abb. 101 :
IR - Spektrum von
 $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot$
 $Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$

In der thermoanalytischen Untersuchung verhält sich die Verbindung relativ einfach: bei 65°C werden in einer Stufe alle H_2O abgegeben (Abb. 102 und 103). Tab. 26 faßt die Entwässerung zusammen.

Wellenzahl cm^{-1}		Zuordnung
IR	Raman	
3695		OH Valenz
3595		H_2O ν_1/ν_3
3500-3000		H_2O ν_1/ν_3
1655		H_2O ν_2
1420		CO_3 ν_3 (Carbonatisierung)
1240	1240	B-OH
1185	1185	B-OH
975		B(OH)_4 ν_3
	955	B(OH)_4 ν_3
790		AlO_6
	760	B(OH)_4 ν_1
680		Al(OH)_6 / Al(OH)_6
560-530		Al(OH)_6 / B(OH)_4 ν_4
430		Ca-O
	215	Gitterschwingungen

Tab. 25 : IR - und Ramanfrequenzen von
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}\{\text{B(OH)}_4\}_2 \cdot \text{Ca(OH)}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$

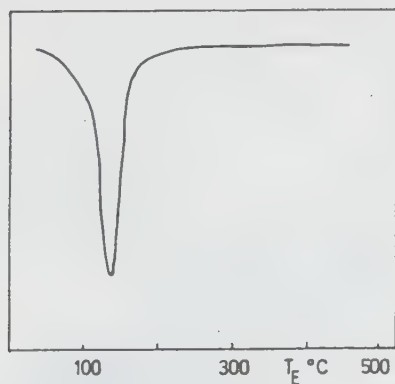


Abb. 102 :
DSC - Aufnahme von
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}\{\text{B(OH)}_4\}_2 \cdot \text{Ca(OH)}_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$
R : $10^\circ/\text{min}$

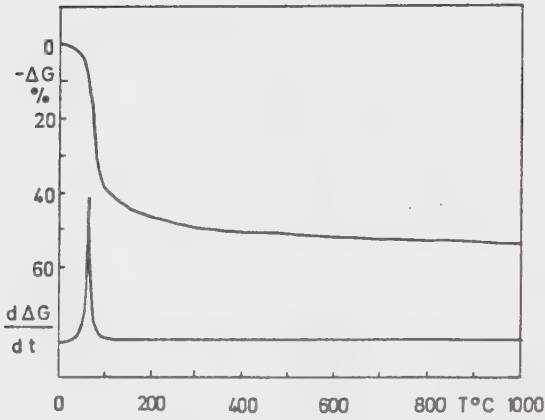
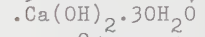


Abb. 103 :

TG - Aufnahme von



R : 1°/min (TG)

10°/min (DTG)

T °C	Gew.verlust %	Rest H ₂ O (ges.)
20	0	39
65	54,0	0
1100	54,0	0

Tab. 26 : Entwässerung von $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}\{\text{B}(\text{OH})_4\}_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 3\text{OH}_2\text{O}$

3.1.2.2. System $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O - C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$

Das System $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O - C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$ bildet die Grundlage für die Untersuchung des Verhaltens der Ettringite bei gleichzeitiger Anwesenheit von SO_4^{2-} und $B(OH)_4^-$ - Anionen. LUKAS (1979) diskutiert einen teilweisen Ersatz von SO_4^{2-} durch OH^- in Ettringiten.

Für eigene Untersuchungen wurden Ansätze folgender Zusammensetzung eingewogen:



SO_3 wurde als $Na_2SO_4 \cdot 10H_2O$, Al_2O_3 als Natriumaluminatlösung eingebracht; CaO wurde in Saccharatbindung verwendet. Nach 5 Tagen bei $4^\circ C$ wurde unter Schutzgas filtriert.

Wie in Abb. 104 zu erkennen ist, sind bis 2,5 Mol % Sulfat-ettringit noch Reste von $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$ zu finden. Die Gitterkonstanten der sulfathaltigen Ettringite nehmen im Bereich von 2,5 bis 10 Mol % stark zu, bleiben bis ca. 80 Mol % relativ konstant und steigen darüber bis auf die Werte des $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$. Dies läßt bereits vermuten, daß die Zusammensetzungen von Präzipitat und Einwaage nicht im gesamten System übereinstimmen. Tab. 27 zeigt die Analyse der Bodenkörper und die daraus berechnete Zusammensetzung.

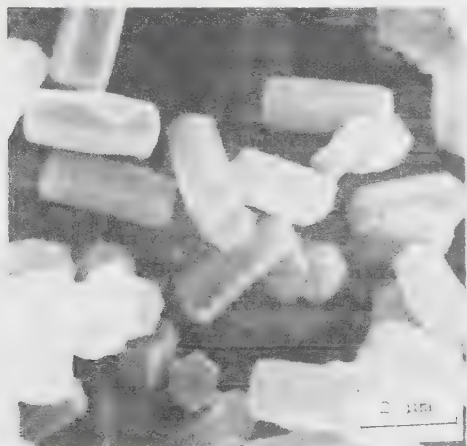


Bild 28 :

Ettringite im System
 $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O -$
 $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$
 REM - Aufnahme

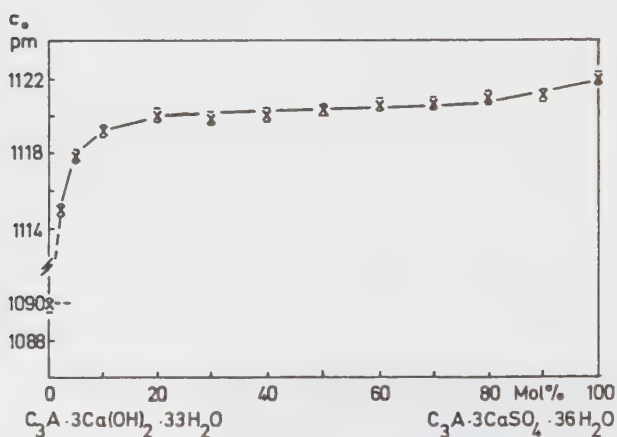
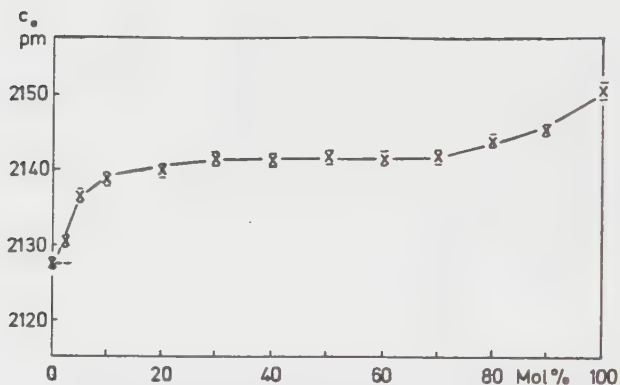


Abb. 104 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O - C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 36H_2O$
 (Saccharatmethode)

Das Angebot an SO_4^{2-} - Anionen wird quantitativ in einem hydroxid- und sulfathaltigen Mischkristall gebunden. Der Austausch OH^- gegen SO_4^{2-} findet nicht linear statt; bereits bei geringen SO_4^{2-} - Gehalten bildet sich ein Mischkristall, in dem 3 OH^- gegen 1,5 SO_4^{2-} ausgetauscht sind.

Einwaage Mol% Sulfat- ettringit	Gew.% SO_4^{2-} gem.	Gew.% H_2O gem.	Zusammensetzung der Kanäle in den Ettringiten
0	0	59,2	6 OH . 3 H_2O
5	11,0	55,1	3 OH . 1,5 SO_4 . 6 H_2O
10	11,8	54,6	2,9 OH . 1,55 SO_4 . 6 H_2O
20	14,5	52,8	2,2 OH . 1,9 SO_4 . 6 H_2O
50	17,3	51,5	1,4 OH . 2,3 SO_4 . 6 H_2O
90	18,1	50,5	1 OH . 2,5 SO_4 . 6 H_2O
100	21,7	49,4	3 SO_4 . 6 H_2O

Tab. 27 : Analyse der Bodenkörper im System



Geringe Mengen an SO_4^{2-} genügen bereits, um sulfatreichere Ettringite zu stabilisieren. Entsprechende Mengen Ca^{2+} und Al^{3+} bleiben in Lösung.

Es ist anzunehmen, daß die OH^- - Ionen in den Kanälen der Struktur bei der Aufbewahrung der Proben an Luft in kurzer Zeit durch CO_3^{2-} - Ionen ersetzt werden.

Der Austausch im System kann formuliert werden:



3.1.2.2.2. Untersuchung von $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30-36 H_2O$ Sulfatettringit

$C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30-36H_2O$ ist eine der wichtigsten Verbindungen, die in der Anfangsphase der Erhärtung von Portlandzement entstehen. Seine spätere Bildung im erhärteten Zementstein wirkt zerstörend (MICHAELIS 1892). Als natürliches Mineral tritt er in Kontaktgesteinen des Ettringer Bellerberges (Eifel) auf (LEHMANN 1874).

Sulfatettringit bildet die Endkomponente mehrerer in dieser Arbeit untersuchter Systeme. Er kann problemlos sowohl auf konventionellem Weg als auch nach der Saccharatmethode dargestellt werden.

Nach der chemischen Analyse (Tab. 28) kommt ihm die Zusammensetzung zu:



	Gew. % gem.	Gew. % ber.
CaO	26,4	25,3
Al ₂ O ₃	6,7	7,7
SO ₃	18,1	18,1
H ₂ O	49,4	48,9
	100,6	100,0

Tab. 28 : chemische Analyse von $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 36H_2O$
dargestellt nach Saccharatmethode

Unterschiede im H₂O - Gehalt wurden von mehreren Bearbeitern festgestellt:

BUHLERT (1971)	30 H ₂ O	KUZEL (1971)	32-33 H ₂ O
PÖLLMANN (1984)	36 H ₂ O	BENSTED (1973)	31-32 H ₂ O
diese Arbeit	30 H ₂ O	(konventionelle Darstellung)	
	36 H ₂ O	(Saccharatmethode)	

Sechs H_2O befinden sich locker gebunden in den Kanälen der Struktur. Sie werden bereits bei geringer thermischer Belastung, Trocknung oder längerem Aufbewahren bei normaler Luftfeuchte abgegeben. Die Darstellung nach der Saccharatmethode begünstigt die Hydratstufe mit 36 H_2O ; andere Verfahren liefern nur niedrigere Wassergehalte.

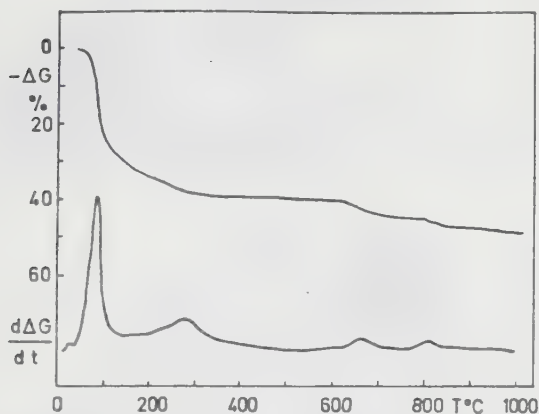


Abb. 105 :
TG - Aufnahme von
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 36\text{H}_2\text{O}$
(dargestellt nach
Saccharatmethode)
R : $1^\circ/\text{min}$ (TG)
 $10^\circ/\text{min}$ (DTG)

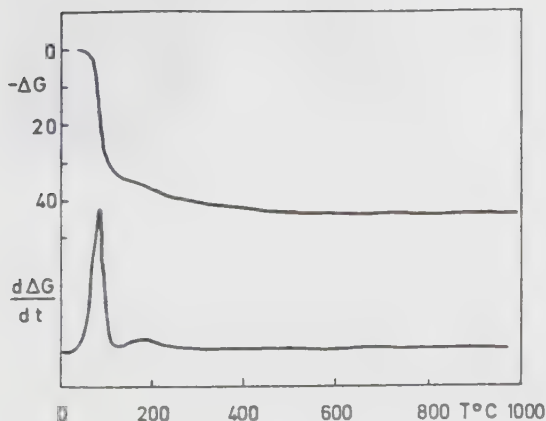


Abb. 106 :
TG - Aufnahme von
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$
(dargestellt auf
konvent. Weg)
R : $1^\circ/\text{min}$ (TG)
 $10^\circ/\text{min}$ (DTG)

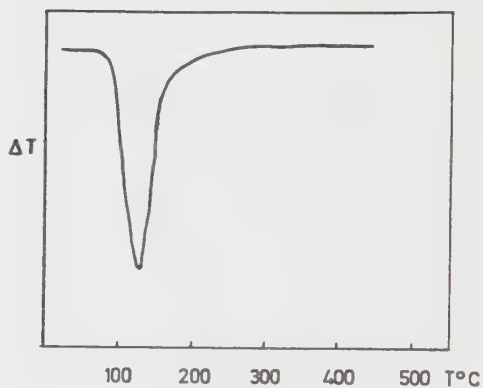


Abb. 107 :
DSC - Aufnahme von
 $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$
R : $10^\circ/\text{min}$

T °C	Gew.verlust %	Rest H_2O ges.
20	0	36
85	33,0	12
250	40,5	6-7
720	45,2	3
870	46,8	2
1100	49,4	0

Tab. 29 : Entwässerung von $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 36H_2O$

T °C	Gew.verlust %	Rest H_2O ges.
20	0	30
80	35,5	6
250	44,5	0
1100	44,5	0

Tab. 30 : Entwässerung von $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$

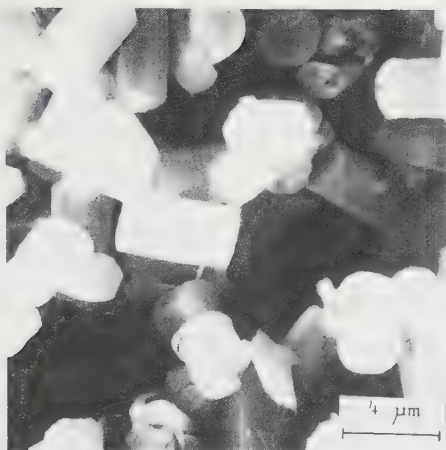
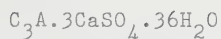


Bild 29 :

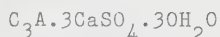


(nach Saccharat-
methode)

REM - Aufnahme



Bild 30 :



(auf Kristallen von



REM - Aufnahme

Die verschiedenen Herstellungsbedingungen äußern sich auch im Habitus der Kristalle : die neben Monosulfat bei relativ niedriger SO_4^{2-} - Konzentration gebildeten Ettringite sind fast nadelig, während die nach der Saccharatmethode gefällten Exemplare kurzprismatisch sind (Bild 29 und 30).

Im IR - Spektrum erkennt man neben der ν_3 -SO₄-Schwingung die ν_1 -SO₄-Bande bei 980 cm⁻¹; die Eigensymmetrie des SO₄ - Tetraeders muß daher kleiner sein als T_h. Die kleine CO₃ - Schwingung bei 1420 cm⁻¹ ist auf Carbonatisierung während der Präparation zurückzuführen.

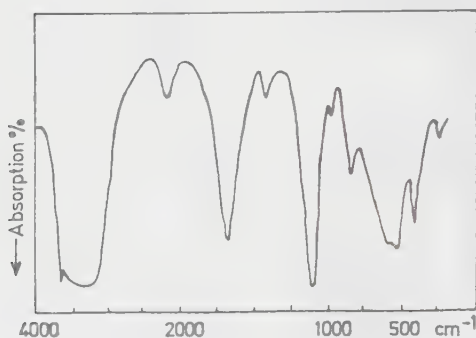


Abb. 108 :
IR - Spektrum von
C₃A.3CaSO₄.30-36H₂O

Wellenzahl cm ⁻¹	Zuordnung
3640	OH Valenz
3600-3200	H ₂ O ν_1/ν_3
2150	SO ₄ ν_3 Oberschwingung
1640	H ₂ O ν_2
1420	CO ₃ ν_3 (Carbonatisierung)
1110	SO ₄ ν_3
980	SO ₄ ν_1
840	Al(OH) ₆
630-530	AlO ₆
420	Ca-O
295	Ca-O

Tab. 31 : IR - Spektrum von C₃A.3CaSO₄.30-36H₂O

3.1.2.3. Systeme Boratettringite - Sulfatettringit

Kristallchemisch interessant und für die Abbindesteuerung von Zementen technisch von Bedeutung ist die Frage, inwieweit ein Ersatz von SO_4^{2-} durch $\text{B}(\text{OH})_4^-$ in Ettringiten möglich ist. Zwei natürliche Ettringite sind bekannt, in denen ein Teil der SO_4^{2-} - Anionen durch $\text{B}(\text{OH})_4^-$ ersetzt ist: (idealisierte Formeln)

Charlesit: $(\text{Ca}_6\{(\text{Al}, \text{Si})(\text{OH})_6\}_2 \cdot 24\text{H}_2\text{O}) \cdot ((\text{SO}_4)_2 \cdot \text{B}(\text{OH})_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O})$

Sturmanit: $(\text{Ca}_6\{(\text{Fe}^{3+}, \text{Al})(\text{OH})_6\}_2 \cdot 24\text{H}_2\text{O}) \cdot ((\text{SO}_4)_2 \cdot \text{B}(\text{OH})_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O})$

In dieser Arbeit wird das Verhältnis beider Boratettringite, $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}\{\text{B}(\text{OH})_4\}_2 \cdot 2\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 36\text{H}_2\text{O}$ und $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}\{\text{B}(\text{OH})_4\}_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$ zu Sulfatettringit $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 30-36\text{H}_2\text{O}$ untersucht.

3.1.2.3.1. System $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}\{\text{B}(\text{OH})_4\}_2 \cdot 2\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 36\text{H}_2\text{O}$ - $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 36\text{H}_2\text{O}$

Zur Untersuchung des Systems wurden folgende Synthesen eingewogen:



B_2O_3 wurde als H_3BO_3 , SO_3 als $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$, Al_2O_3 als Natriumaluminatlösung und CaO in Saccharatbindung eingebracht.

Als Bodenkörper treten im System ausschließlich Ettringite auf. Die chemische Analyse und der Verlauf der Gitterkonstanten zeigen, daß der Anionenaustausch nicht nur zwischen $\text{B}(\text{OH})_4^-$ und SO_4^{2-} stattfindet, sondern auch OH^- und H_2O beteiligt sind. Einwaage und Präzipitat unterscheiden sich in der Zusammensetzung, d.h. Ca^{2+} und Al^{3+} bleiben teilweise in Lösung. Die aus der Analyse der Festkörper ermittelten Molzahlen sind in Abb. 110 zusammengefaßt.

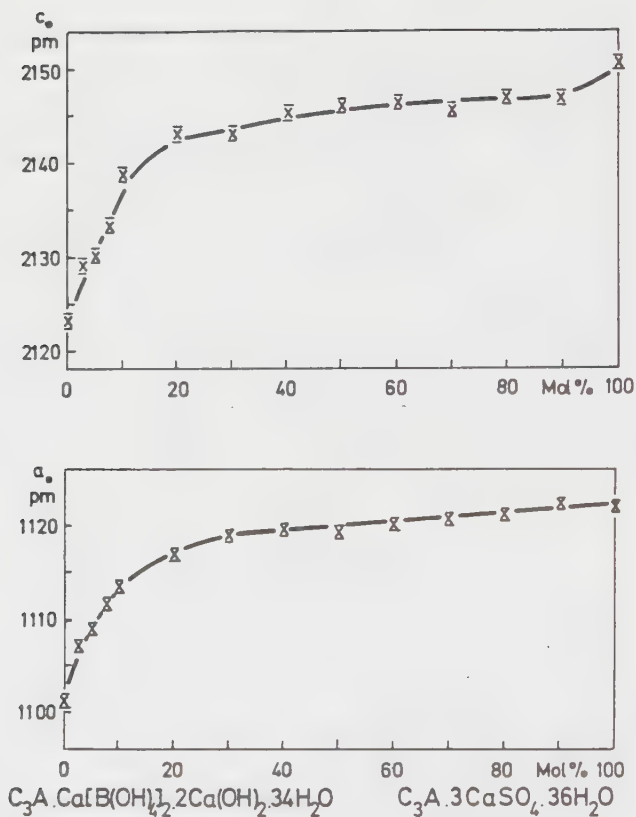


Abb. 109 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A.Ca\{B(OH)_4\}_2.2Ca(OH)_2.36H_2O - C_3A.3CaSO_4.36H_2O$
 bei 4°C (Saccharatmethode)

Der $B(OH)_4^-$ - Gehalt der Ettringite nimmt nahezu linear mit fallendem B_2O_3 - Gehalt der Einwaage ab. Die Zunahme von SO_4^{2-} im Bereich bis ca. 15 Mol % Sulfatettringit ist korreliert mit einer Abnahme von OH^- . Der H_2O - Gehalt ist starken Schwankungen unterworfen; er erreicht bei 50 Mol % Sulfatettringit ein Minimum.

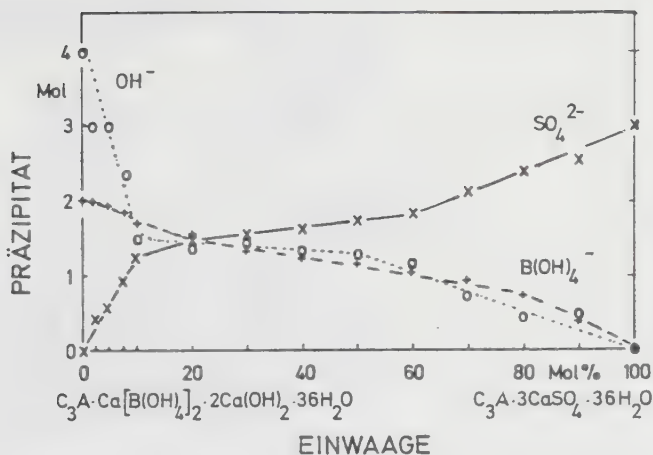


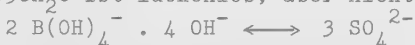
Abb. 110 : Molzahlen der Hohlraumzusammensetzung der Ettringite im System $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O$ - $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 36H_2O$ als Funktion der Einwaage (H_2O - Darstellung nicht eingetragen)

Der Anstieg der Gitterkonstanten bei geringen SO_4^{2-} - Gehalten ist damit zum Großteil auf den Austausch OH^- gegen SO_4^{2-} zurückzuführen. Bei 20 Mol % Sulfatettringit bezogen auf die Einwaage lautet die Hohlraumzusammensetzung des entstandenen Ettringits:



Die Mischkristalle werden also durch den Einbau von 1 bis 1,5 SO_4^{2-} stabilisiert. Parallelen zum System Hydroxidetrtringit - Sulfatettringit sind damit erkennbar.

Der Austausch im System $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O$ - $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 36H_2O$ ist lückenlos, aber nicht linear:



Zur genaueren Charakterisierung der Mischkristalle muß eine Bearbeitung des Dreistoffsystems $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O$ - $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O$ - $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 36H_2O$ erfolgen.

Zus. setzung Einwaage Mol% (3SO ₄) ²⁻	Analyse (%)			Hohlraum (Molzahlen)				H ₂ O	H ₂ O ges.
	SO ₃	B ₂ O ₃	H ₂ O	SO ₄ ²⁻	B(OH) ₄ ⁻	OH ⁻	H ₂ O		
0	0	5.7	60.8	0	2	4	6	42	
2.5	2.9	5.5	57.7	0.5	2	3	5.9	41.5	
5	3.6	5.2	57.3	0.55	1.93	3.05	5.8	41.1	
7.5	5.75	4.9	55.0	0.92	1.80	2.36	4.2	39.0	
10	7.9	4.5	53.7	1.28	1.68	1.76	4.3	38.6	
20	9.2	4.2	52.8	1.49	1.56	1.46	4.1	38.0	
30	9.8	3.9	52.0	1.57	1.42	1.44	4.0	37.5	
40	10.5	3.5	51.8	1.68	1.28	1.36	3.6	36.8	
50	11.3	3.3	50.0	1.75	1.18	1.32	1.9	34.9	
60	12.0	2.9	50.1	1.88	1.04	1.20	2.1	34.8	
70	13.6	2.6	49.2	2.15	0.94	0.76	3.3	34.6	
80	15.0	2.0	48.7	2.39	0.74	0.48	3.9	35.6	
90	15.8	1.0	49.4	2.56	0.38	0.5	4.6	35.6	
100	18.1	0	48.7	3	0	0	5.8	35.8	

Tab. 32: Analyse und Hohlraumzusammensetzung der Ettringite im System C₃A.Ca(B(OH)₄)₂.2Ca(OH)₂.36H₂O
- C₃A.3CaSO₄.36H₂O

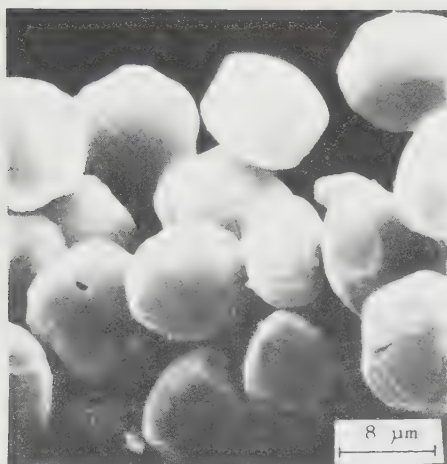
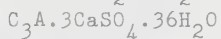
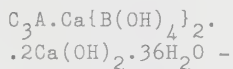
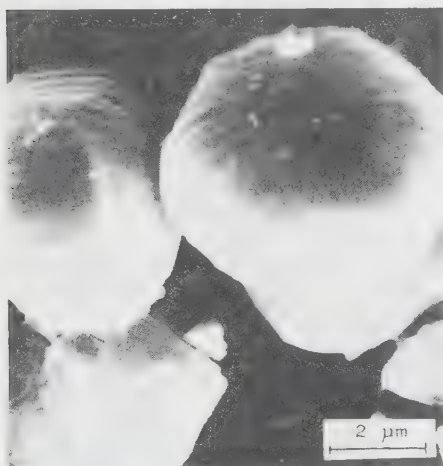


Bild 31 und 32 :
Mischkristalle im
System



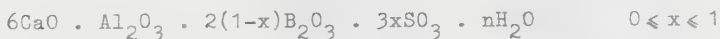
REM - Aufnahmen



Mit ihrer flachen, gedrunenen Gestalt zeigen die Mischkristalle Ähnlichkeit mit den natürlichen Mineralen Charlesit und Sturmanit.

3.1.2.3.2. System $C_3A \cdot 2Ca[B(OH)_4]_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ -
 $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$ bei $40^\circ C$

Zur Untersuchung des Systems wurden die Ansätze eingewogen:



Al_2O_3 wurde als $CaO \cdot Al_2O_3$, B_2O_3 als H_3BO_3 und SO_3 als $CaSO_4 \cdot 2H_2O$ eingebracht. Nach sieben Monaten Reaktionszeit wurden die Proben abfiltriert.

Die Gitterkonstanten der entstandenen Ettringite sind in Abb. 111 wiedergegeben; laminare Verbindungen entstanden nicht.

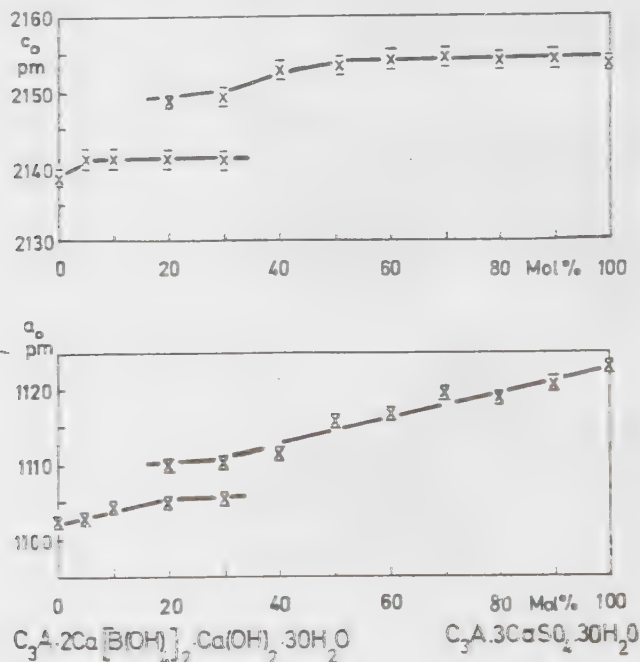


Abb. 111 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot 2Ca[B(OH)_4]_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ - $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$
 bei $40^\circ C$

Die Analyse der Filtrate zeigt, daß die Bindung der Anionen SO_4^{2-} und $\text{B}(\text{OH})_4^-$ an den Festkörper vollständig ist. Zwischen <20 und >30 Mol % Sulfatettringit liegen zwei Ettringite nebeneinander vor; eine röntgenographische Trennung der Phasen gelingt nur auf Guinieraufnahmen.

Die Grenzmischkristalle weisen sehr wahrscheinlich folgende Zusammensetzung der Strukturkanäle auf:

boratreich: $3,33 \text{ B}(\text{OH})_4^-$. $0,5 \text{ SO}_4^{2-}$. $1,77 \text{ OH}^-$. m H_2O
 sulfatreich: $2,67 \text{ B}(\text{OH})_4^-$. 1 SO_4^{2-} . $1,33 \text{ OH}^-$. m H_2O

Inwieweit OH^- im Laufe der Zeit durch CO_3^{2-} ersetzt wird, muß dahingestellt bleiben.

Der Austausch im System $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}\{\text{B}(\text{OH})_4\}_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$ - $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$ läßt sich formulieren:

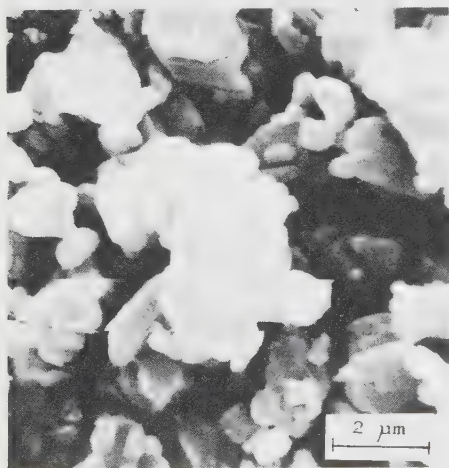
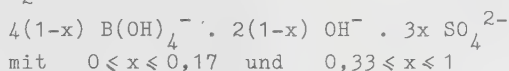


Bild 33 :
 Kristalle im System
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}\{\text{B}(\text{OH})_4\}_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$ -
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$
 REM - Aufnahme

3.1.2.3.3. System $C_3A \cdot 2Ca[B(OH)_4]_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ -
 $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$ bei $20^\circ C$

Für die Untersuchung des Systems Boratettringit - Sulfatettringit bei $20^\circ C$ wurde von den gleichen Einwaagen und Reaktionszeiten ausgegangen wie bei $4^\circ C$.

Im Unterschied zum Ansatz bei $4^\circ C$ sind die Komponenten des Systems bei $20^\circ C$ voll mischbar (Abb. 112); die Bildung laminarer Verbindungen kann unterdrückt werden.

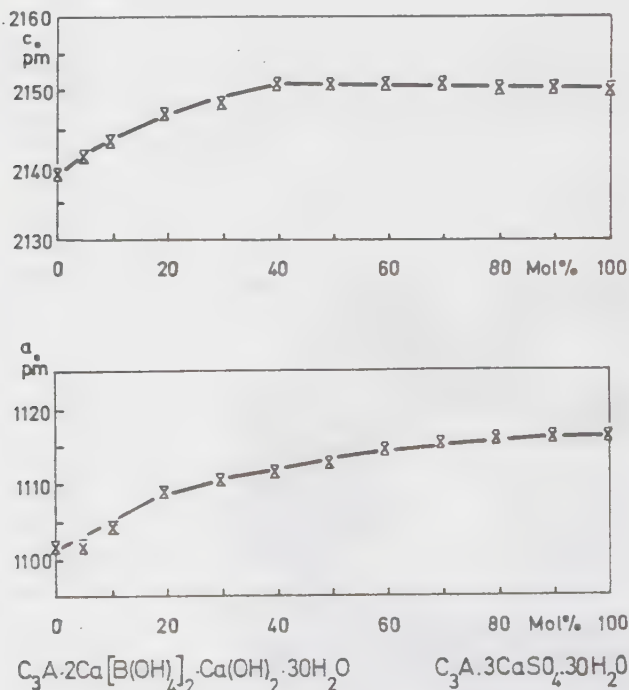


Abb. 112 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A \cdot 2Ca[B(OH)_4]_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ - $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$
bei $20^\circ C$

Da sich weder SO_4^{2-} noch merkliche Anteile ($< 0,5\%$) $\text{B}(\text{OH})_4^-$ in Lösung befinden, kann der Austausch formuliert werden:

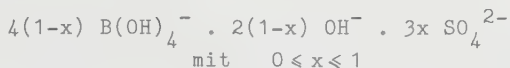


Bild 34 :
sulfatreiche Misch-
kristalle im System
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}\{\text{B}(\text{OH})_4\}_2 \cdot$
 $\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O} -$
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$
bei 20°C
REM - Aufnahme

Das unterschiedliche Verhalten der Mischkristalle bei verschiedenen Temperaturen kann eventuell auf Ordnungs- Unordnungszustände zurückgeführt werden.

3.1.2.4. Systeme Hydroxid-ettringit - Chlorid-ettringit und Borat-ettringite - Chlorid-ettringite

Die Existenz eines chloridhaltigen Ettringits wird seit geraumer Zeit diskutiert. SERB-SERBINA et al. (1956), SCHWIETE (1969) und BUHLERT (1971) geben Röntgendaten an. Letzterer kann die Reflexe der erhaltenen Verbindung erst nach Verdoppelung der Gitterkonstante a_0 indizieren. Alle Autoren erhielten den chloridhaltigen Ettringit bei Temperaturen unter 0°C . RICHARTZ (1969) beschreibt eine "Stabilisierung" des Chlorid-ettringits durch Zusatz von CaSO_4 ; auch LUKAS (1979) hält einen begrenzten Einbau von Cl^- in Sulfat-ettringit für denkbar.

3.1.2.4.1. System $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 33\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$

Zur Untersuchung des Systems Hydroxid-ettringit - Chlorid-ettringit wurde eine Syntheseriehe angesetzt:



Cl_2 wurde als NaCl , Al_2O_3 als Natriumaluminatlösung und CaO in Saccharatbindung eingebracht. Die teilweise sehr geringen Mengen an ausgefallenen Bodenkörpern wurden unter CO_2 - Ausschluß filtriert und vorsichtig getrocknet.

Der Verlauf der Gitterkonstanten zeigt mit steigendem Cl^- - Gehalt der Einwaage eine leichte Abnahme von c_0 , während sich a_0 außer beim Hydroxid-ettringit mit Abweichungen um den Wert von 1088 pm bewegt (Abb. 113).

Die chemische Analyse der Bodenkörper liefert die Begründung für dieses Verhalten. Der gemessene Cl^- - Gehalt aller Ettringite dieses Systems liegt unter 1 Gew. %, während der theoretische Gehalt für Cl^- - Ettringit ca. 17,7 % betragen müßte.

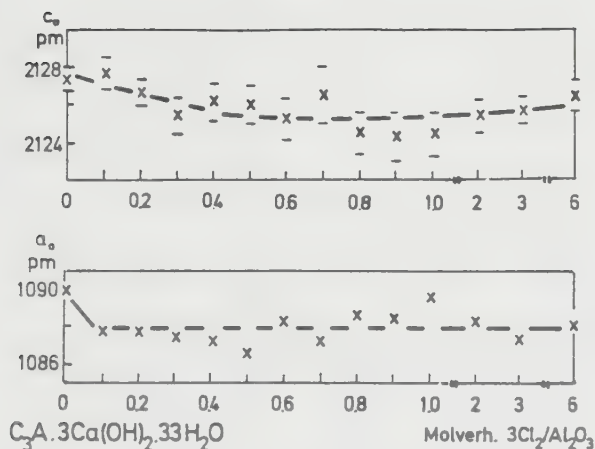


Abb. 113 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O - C_3A \cdot 3CaCl_2 \cdot nH_2O$ bei $4^\circ C$ (Saccharatmethode)

Daraus kann geschlossen werden, daß die Bodenkörper im System $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O - C_3A \cdot 3CaCl_2 \cdot nH_2O$ als leicht carbonatisierter Hydroxidtettringit mit sehr geringen Chloridgehalten angesehen werden müssen. Reiner Chloridettringit ist damit nach der Saccharatmethode nicht darstellbar; möglich ist ein geringer Cl - Einbau in $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$.

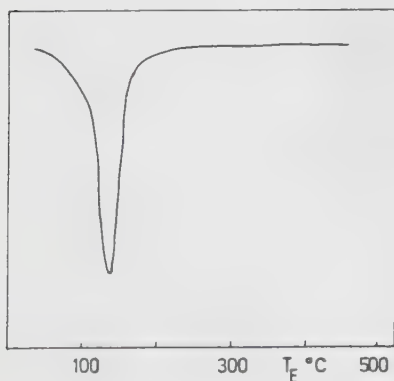


Abb. 114 :
DSC - Aufnahme von
Cl - haltigem
 $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$
R : $10^\circ/min$

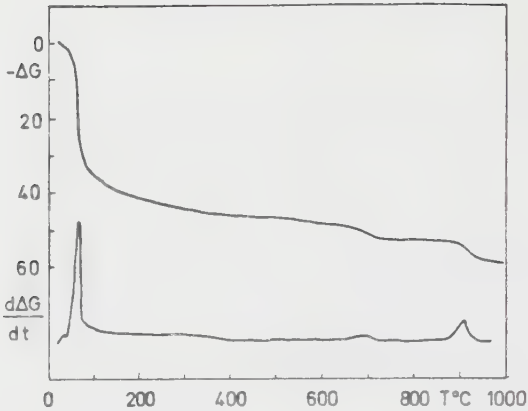


Abb. 115 :
TG - Aufnahme von
Cl - haltigem
 $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$

Das thermische Verhalten eines Cl - haltigen Hydroxidetrin-
gits ist in Abb. 114 und 115 und Tab. 33 zusammengefaßt; die
Ähnlichkeit mit der reinen Verbindung ist unverkennbar.

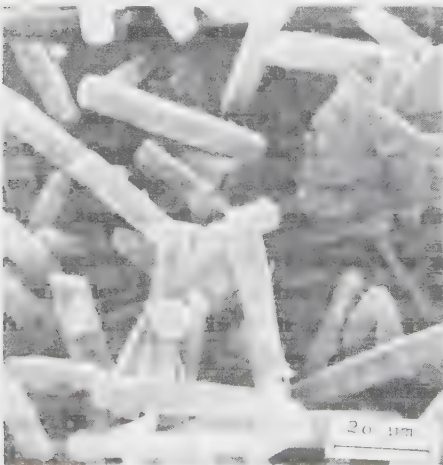


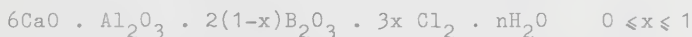
Abb. 116 :
Cl - haltiger
 $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$
REM - Aufnahme

T °C	Gew.verlust %	Rest H ₂ O ges.
20	0	36
35	2	35
75	40	12
kont. bis		
450	46,6	8
720	53,1	4
910	59,6	0

Tab. 33 : Entwässerung eines Cl - haltigen $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$

3.1.2.4.2. System $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O - C_3A \cdot 3CaCl_2 \cdot nH_2O$

Zur Bearbeitung des Systems wurde eine Syntheseriehe mit



angesetzt. Cl_2 wurde als NaCl, Al_2O_3 als Natriumaluminatlösung und CaO als gelöstes Calciumsaccharat eingebracht.

Die mengenmäßig geringe Ausbeute an Präzipitat wurde unter Schutzgas abfiltriert.

Im System werden nur Ettringite gebildet. Erst bei deutlicher Abnahme des B_2O_3 - Gehaltes zeigen die Gitterkonstanten eine geringe Änderung. Der Wert a_0 der boratfreien Endkomponente unterscheidet sich von den Gitterkonstanten der Mischkristalle so erheblich, daß eine durchgehende Mischbarkeit nicht anzunehmen ist (Abb. 116).

Die Analyse der Bodenkörper macht deutlich, daß die Zusammensetzung von Einwaage und Präzipitat nicht identisch ist. Cl_2 wird in die entstandenen Ettringite mit maximal 0,7 % eingebaut. Ansonsten gleicht dieses System dem in 3.1.2.1.1. beschriebenen System $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O - C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 33H_2O$. Der Ersatz von $B(OH)_4^-$ durch OH^-

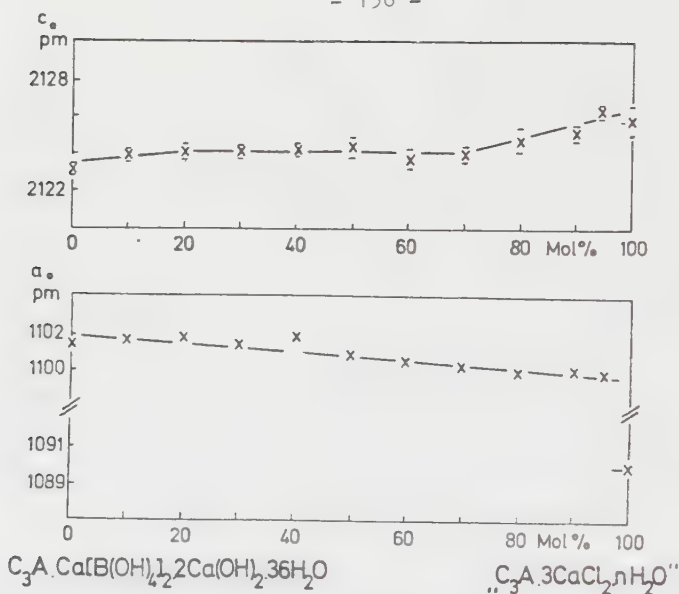


Abb. 116 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A.Ca\{B(OH)_4\}_2.2Ca(OH)_2.36H_2O - 'C_3A.3CaCl_2.nH_2O'$
 bei 4°C (Saccharatmethode)

Einwaage		Analyse der Bodenkörper		
Mol %		Gew. %	Gew. %	Gew. %
Cl- Ettringit		B ₂ O ₃	H ₂ O	Cl ₂
0		5,7	60,3	-
10		5,7	59,8	-
20		5,6	59,9	-
30		5,4	59,8	-
40		5,1	59,9	-
50		5,0	60,6	0,1
60		5,1	60,9	0,1
70		5,0	61,0	0,2
80		4,7	60,7	0,2
90		4,5	60,0	0,3
95		4,0	60,3	0,5
97,5		3,6	60,2	0,5
100		0	60,3	0,7

Tab. 34 : Analyse der Bodenkörper im System
 $C_3A.Ca\{B(OH)_4\}_2.Ca(OH)_2.36H_2O - 'C_3A.3CaCl_2.nH_2O'$

kann bis zu $1/3$ verfolgt werden. Da der Austausch nicht linear erfolgt, bleiben Ca^{2+} und Al^{3+} teilweise in Lösung. Nach diesen Ergebnissen variiert die Zusammensetzung der Mischkristalle des Systems zwischen:



Der geringe Cl - Gehalt ist dabei nicht berücksichtigt. Die Stabilisierung eines Cl- Ettringits durch B(OH)_4^- ist also in diesem System nicht möglich.

3.1.2.4.3. System $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}\{\text{B(OH)}_4\}_2 \cdot \text{Ca(OH)}_2 \cdot 3\text{OH}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ bei 4°C

Das System $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}\{\text{B(OH)}_4\}_2 \cdot \text{Ca(OH)}_2 \cdot 3\text{OH}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ wurde aus Ansätzen der Stöchiometrie



synthetisiert. Al_2O_3 wurde als $\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$, B_2O_3 als H_3BO_3 und Cl_2 als $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ zugegeben. Das System wurde vier Monate bei 4°C belassen.

Die Ergebnisse sind in Abb. 117 zusammengefaßt. In der boratreichen Hälfte des Systems bildet sich unverändertes $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}\{\text{B(OH)}_4\}_2 \cdot \text{Ca(OH)}_2 \cdot 3\text{OH}_2\text{O}$. Das angebotene Cl^- wird z. T. in einem rhomboedrischen laminaren Mischkristall fixiert, z. T. in Lösung gehalten. Chloridettringit oder ein chloridhaltiger Ettringit werden nicht gebildet; die Endkomponente des Systems ist monoklines Monochlorid.

Eine "Stabilisierung" von $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ist auch in diesem System nicht möglich; die Anwesenheit von Cl^- verhindert im Gegenteil die Bildung von Boratettringit zugunsten laminarer Verbindungen.

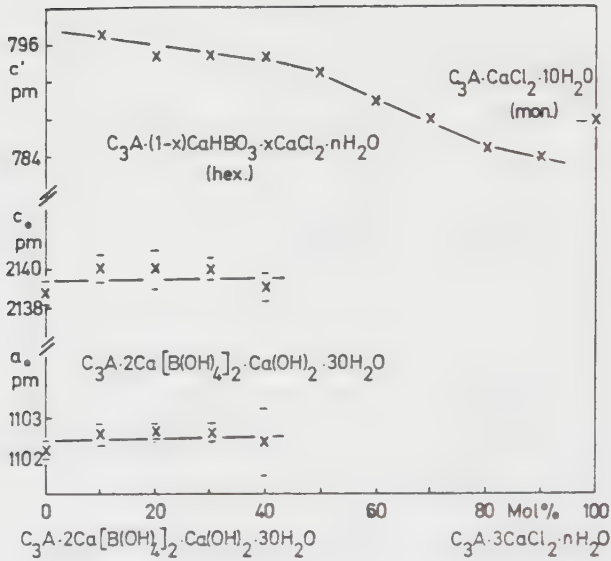


Abb. 117 : Gitterkonstanten und Phasenbestand im System

$C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ - " $C_3A \cdot 3CaCl_2 \cdot nH_2O$ "
bei $4^\circ C$

3.1.2.5. Systeme Boratettringite - Carbonatettringit

Die unvermeidbare Gegenwart von Luft - CO_2 erfordert die Berücksichtigung der Wirkung des Einbaues von CO_3^{2-} bei der Zement erhärtung.

LUKAS (1979) beschreibt den teilweisen Ersatz von SO_4^{2-} durch CO_3^{2-} in der Struktur des Sulfatettringits. PÜLLMANN (1984) untersucht die Mischkristallbeziehungen von $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ mit einigen anderen Ettringiten. Thaumasis, das dem Sulfatettringit nah verwandte Verwitterungsprodukt in Putzen (LEIFELD et al. 1970) enthält in den Kanälen der Struktur abwechselnd SO_4^{2-} - und CO_3^{2-} - Gruppen.

3.1.2.5.1: System $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca} \{ \text{B}(\text{OH})_4 \}_2 \cdot 2\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 36\text{H}_2\text{O}$ - $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCO}_3 \cdot 32\text{H}_2\text{O}$

Die Bearbeitung des Systems erfolgte durch Synthesen der Zusammensetzung:

$6\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot (1-x)\text{B}_2\text{O}_3 \cdot x\text{CO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} \quad 0 \leq x \leq 1$
 Al_2O_3 wurde als Natriumaluminatlösung, B_2O_3 als H_3BO_3 , CO_2 als Na_2CO_3 und CaO in Saccharatbindung eingebracht.

Wie in Abb. 118 wiedergegeben, ist das System bis auf die Mischungslücke ab 83 Mol % Carbonatettringit einphasig. Laminare Phasen werden nicht gebildet. Die Ettringite der Mischungslücke lassen sich wegen der nur wenig verschiedenen c_0 - Gitterkonstanten nur auf Guinieraufnahmen röntgenographisch trennen. Unter dem REM erkennt man jedoch durch ihren unterschiedlichen Habitus den langprismatischen Carbonatettringit und den kurzprismatischen Mischkristall (Bild 36).

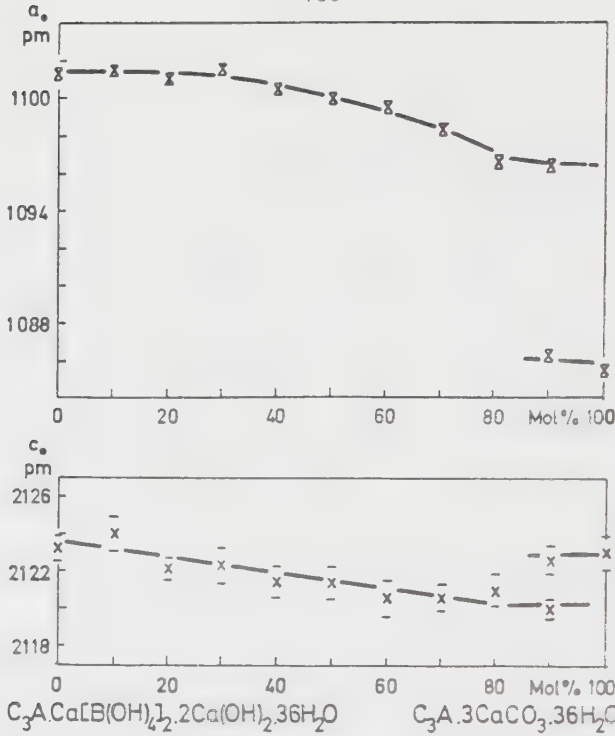


Abb. 118 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3A.Ca\{B(OH)_4\}_2.2Ca(OH)_2.36H_2O - C_3A.3CaCO_3.36H_2O$

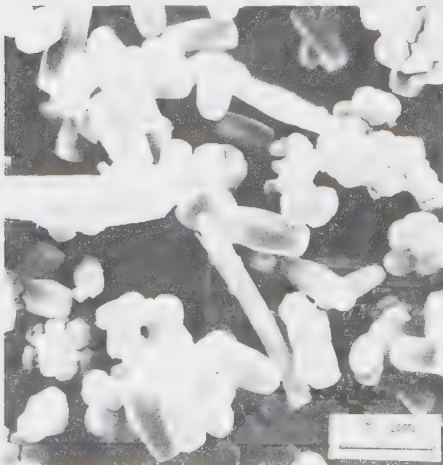


Abb. 119 :

Ettringite im Bereich
 der Mischungsreihe
 des Systems

$C_3A.3CaCO_3.36H_2O$
 $- C_3A.Ca\{B(OH)_4\}_2.2Ca(OH)_2.36H_2O$

$C_3A.3CaCO_3.36H_2O$

REM - Aufnahme

Auch in diesem System weicht die Zusammensetzung der Mischkristalle von der der Einwaage ab. Ca^{2+} und Al^{3+} bleiben teilweise in Lösung. Tab. 35 stellt die chemische Analyse des Festkörpers und die berechnete Hohlraumzusammensetzung zusammen.

Einwaage Mol %	Analyse			Molzahlen	
	Gew. %	Gew. %	Gew. %	n CO_3^{2-}	m B(OH)_4^-
CO_3^- - Ettringit	$\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$	CO_2	B_2O_3		
0	60,3	0	5,7	0	2
10	61,8	6,5	5,3	2	2
20	62,0	6,7	5,1	2,05	1,9
30	61,9	7,0	4,8	2,1	1,8
40	61,8	7,3	4,6	2,15	1,7
50	61,5	7,6	4,3	2,2	1,6
60	61,8	7,9	4,0	2,3	1,4
70	61,8	8,3	3,4	2,4	1,2
80	61,9	9,0	2,7	2,5	1,0
100	62,1	11,6	0	3,0	0

Tab. 35 : Analyse der Ettringite im System

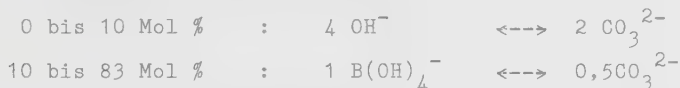


In den Kanälen der Struktur ist kein OH^- vorhanden; es wird vollständig durch CO_3^{2-} ersetzt.

In der Mischungslücke des Systems ist neben $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCO}_3 \cdot 32\text{H}_2\text{O}$ der Grenzmischkristall stabil:



Im System findet ein doppelter Austausch der Anionen statt:



3.1.2.5.2. System $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ -
 $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot nH_2O$

Zur Untersuchung des Systems wurden Proben folgender Zusammensetzung eingewogen:



Al_2O_3 wurde als $CaO \cdot Al_2O_3$, B_2O_3 als H_3BO_3 und CO_2 als $CaCO_3$ eingebracht. Nach sieben Monaten Reaktionszeit bei 4 bzw. 20°C wurden die Bodenkörper abfiltriert.

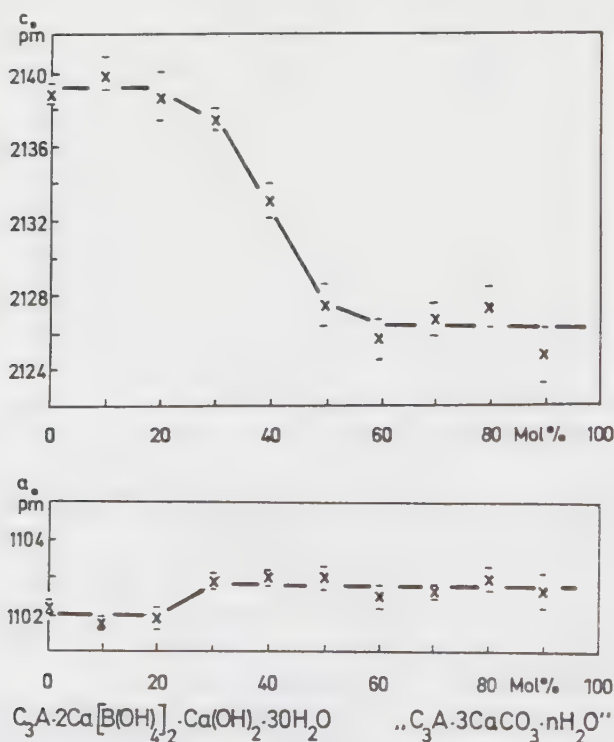


Abb. 119 : Gitterkonstanten der Ettringite im System
 $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ - $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot nH_2O$
 bei 4°C

Mit steigendem CO_3 - Angebot fällt bei beiden Reihen die Gitterkonstante c_o der gebildeten Ettringite in Richtung der Werte von Carbonatettringit. a_o ändert sich in beiden Fällen nur wenig (Abb. 119 und 120). Aus dem Verlauf der Gitterkonstanten kann nur auf einen Einbau von CO_3^{2-} in die Ettringite geschlossen werden.

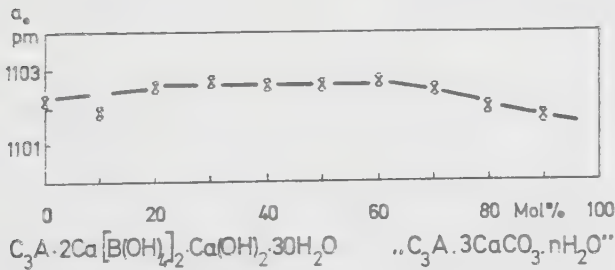
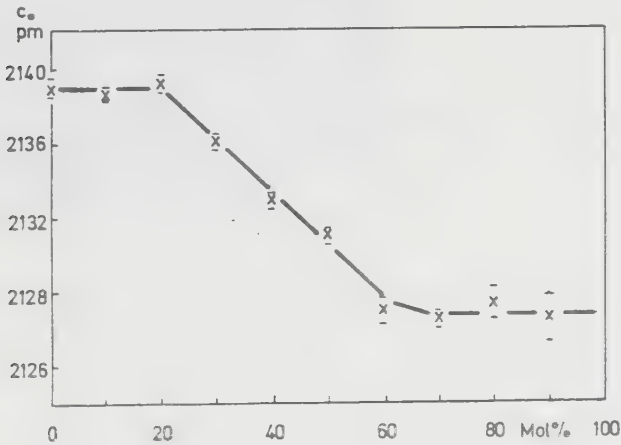


Abb. 120 : Gitterkonstanten der Ettringite im System
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$
 bei 20°C

B_2O_3 befindet sich quantitativ in den Bodenkörpern des Systems. Mit wachsendem CO_3^{2-} - Angebot werden neben den Ettringiten weitere Phasen stabil. Bis ca. 50 Mol % Carbonatettringit wird ein laminarer Mischkristall gebildet, dessen Zwischenschicht CO_3^{2-} , HBO_3^{2-} und OH^- enthält. Bei höheren Carbonatgehalten erscheinen Calcit und Monocarbonat. Die Endkomponente $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot nH_2O$ entsteht unter den gegebenen Bedingungen nicht.

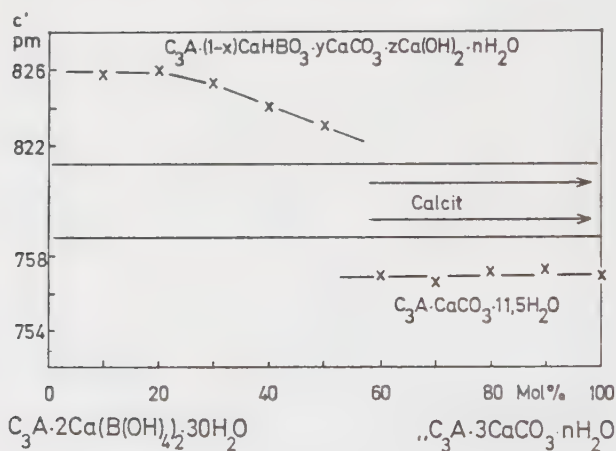
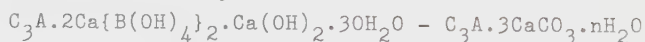
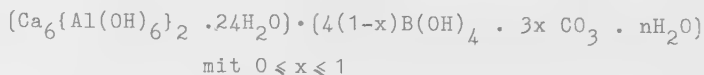


Abb. 121 : Nebenphasen im System



Die Existenz der Nebenphasen verhindert die Angabe der exakten Zusammensetzung der Ettringite.

Nach den Ergebnissen von 3.1.2.5.1. kann angenommen werden, daß bei Anwesenheit von CO_3^{2-} kein OH^- sich in den Hohlräumen der Struktur befindet. Die Angabe der Zusammensetzung muß auf die Formel beschränkt bleiben:



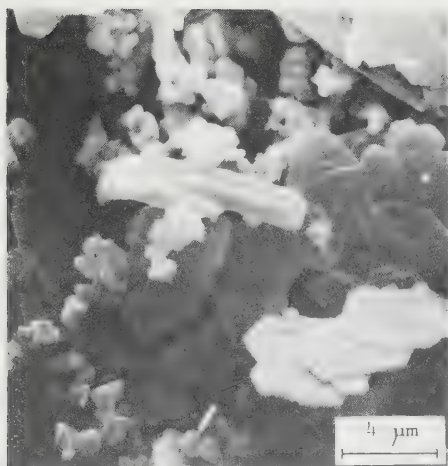


Bild 37 :
Phasen im System
 $C_3A \cdot 2Ca[B(OH)_4]_2 \cdot$
 $Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O -$
 $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot nH_2O$
REM - Aufnahme

Bild 37 zeigt laminare Phasen und Ettringite im System
 $C_3A \cdot 2Ca[B(OH)_4]_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O - C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot nH_2O$.

3.1.2.5.3. Untersuchung von $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$ Carbonatettringit

Als Komponente des Systems $C_3A \cdot Ca[B(OH)_4]_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O - C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$ wurde Carbonatettringit in die Untersuchungen mit einbezogen.

Reines $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$ ist nur nach der Saccharatmethode darstellbar, während CO_3^{2-} - haltige Mischkristalle auch auf anderen Wegen synthetisiert werden können.

CARLSON und BERMAN (1960) und BERMAN (1965) berichten über die Darstellung bzw. die Bildungswärme dieser Verbindung. Den thermoanalytischen Untersuchungen von BERMAN ist jedoch zu entnehmen, daß die Proben noch Saccharose enthielten; ein exothermer Peak bei $390^{\circ}C$ weist darauf hin.

DSC- und TG- Aufnahmen zeigen die für Ettringite charakteristische H_2O - Abgabe bei ca. 70°C . Der vorgelagerte kleine Entwässerungspeak, der bei wasserreicheren Ettringiten auftritt, fehlt. Ab 700°C kommt zur Dehydratation die Decarbonatisierung.

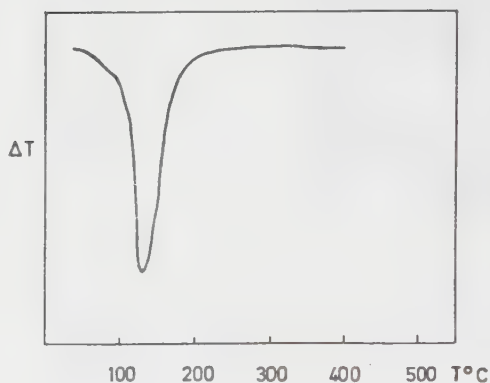


Abb. 122 :
DSC - Aufnahme
von
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCO}_3 \cdot 32\text{H}_2\text{O}$
R : $10^\circ/\text{min}$

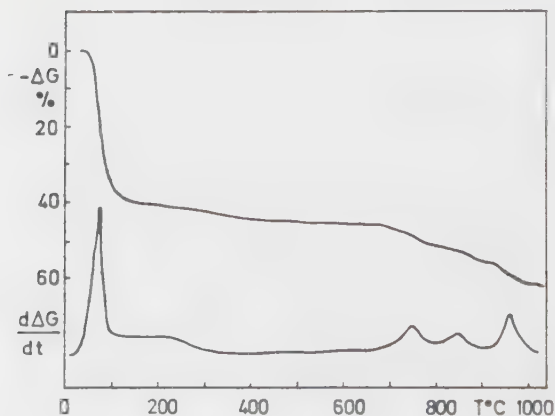
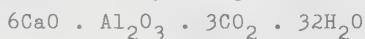


Abb. 123 :
TG - Aufnahme
von
 $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCO}_3 \cdot 32\text{H}_2\text{O}$
R : $1^\circ/\text{min}$
 $10^\circ/\text{min}$

T °C	Gew.verlust %	Rest H ₂ O ges.
20	0	32
70	45,6	3
750	51,2	H ₂ C - Abgabe und
830	54,3	Decarbonatisierung
940	61,8	
1100	62,1	

Tab. 36 : Entwässerung von $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$

Nach der chemischen Analyse ergibt sich die Zusammensetzung:



Daraus wird die Strukturformel abgeleitet:



	Gew. % gem.	Gew. % ber.
CaO	28,7	29,3
Al ₂ O ₃	8,5	8,9
CO ₂	11,6	11,5
H ₂ O	50,5	50,3
	99,3	100,0

Tab. 37 : chemische Analyse von $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$

REM - Aufnahmen zeigen den langprismatischen Habitus der Kristalle und ihre Neigung, Durchkreuzungszwillinge zu bilden.



Bild 38 und 39 :
Kristalle von
 $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$
REM - Aufnahmen



In der IR - spektroskopischen Untersuchung erscheinen neben den H_2O - , Al^{VI} - und $Ca-O$ - Banden ausgeprägte CO_3 - Schwingungen. Eine kleine, verbreiterte Bande bei 1050 cm^{-1} ist wahrscheinlich nicht der ν_1-CO_3 zuzuschreiben, da diese normalerweise als scharfer Peak auftritt.

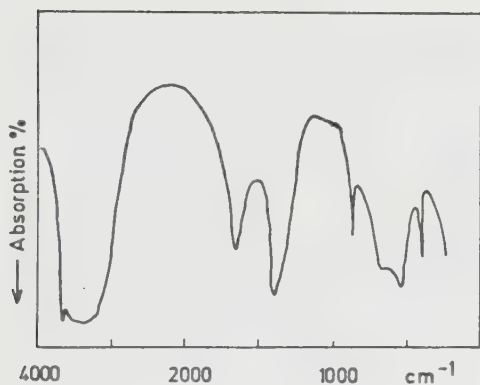


Abb. 124 :
IR - Spektrum von
 $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$

Wellenzahl cm ⁻¹	Zuordnung
3640	OH Valenz
3600-3000	H ₂ O v ₁ /v ₃
1650	H ₂ O v ₂
1415	CO ₃ v ₃
880	CO ₃ v ₂
650-530	Al(OH) ₆ / AlO ₆
425	Ca-O
300	Ca-O

Tab. 38 : IR - Spektrum von $C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$

Hinweise auf Symmetrierniedrigung sind im IR - Spektrum nicht zu erkennen, da die CO₃ - Gruppe die von ihrer Lage her geforderte Eigensymmetrie von D_{3h} besitzt.

3.2 CALCIUMFERRITHYDROXISALZE

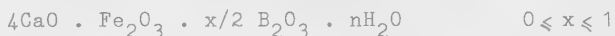
Die in dieser Arbeit dargestellten Verbindungen erforderten die Synthese aus $2\text{CaO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$ und CaO mit H_2O . Im Gegensatz zu den Calciumaluminaten ist C_2F sehr reaktionsträge; bei den Synthesen muß mit Reaktionszeiten von 9 Monaten und länger gerechnet werden. Die Gefahr der Carbonatisierung nimmt dabei stark zu.

Die experimentellen Probleme ließen in dieser Arbeit bis zum jetzigen Zeitpunkt nur die Untersuchung zweier Systeme zu.

3.2.1. System $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

Als Grundlage zum Verständnis des Einbaus von B_2O_3 in Calciumferrithydrate muß das System $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ untersucht werden.

Für Synthesen wurden die Zusammensetzungen eingewogen:



Fe_2O_3 wurde als $2\text{CaO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$, B_2O_3 als H_3BO_3 eingesetzt.

Nach 10 Monaten bei 20°C wurde unter Schutzgas abfiltriert.

Bereits bei geringen B_2O_3 - Gehalten erscheint $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ mit über das Gesamtsystem gleichbleibenden Gitterkonstanten. $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} \triangleq \text{TCFH}$ wird nicht gebildet oder ist während der langen Reaktionszeit wieder in $\text{Ca}(\text{OH})_2$ und $\text{Fe}(\text{OH})_3$ zerfallen. Die Gitterkonstanten von $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} \triangleq \text{Fe-Monoborat}$ deuten an, daß, in Analogie zu den Al - Verbindungen, keine Mischbarkeit zwischen den Komponenten des Systems vorhanden ist. Nach den Röntgendaten kann dem Fe - Monoborat eine rhomboedrische Sechsschichtstruktur zugeordnet werden. Die Gitterkonstanten bei 100 und 35 % r.F. sind praktisch gleich.

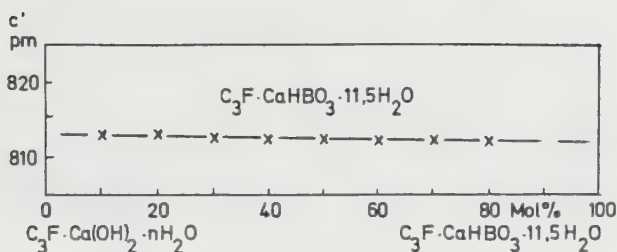


Abb. 125 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3F \cdot Ca(OH)_2 \cdot nH_2O - C_3F \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ bei $20^\circ C$ und 100 % r.F.

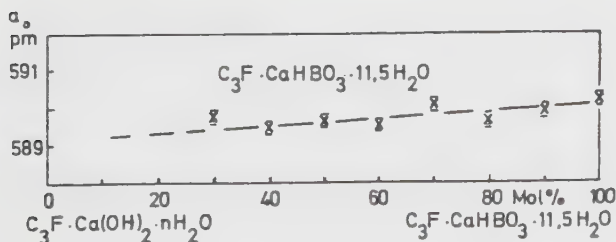
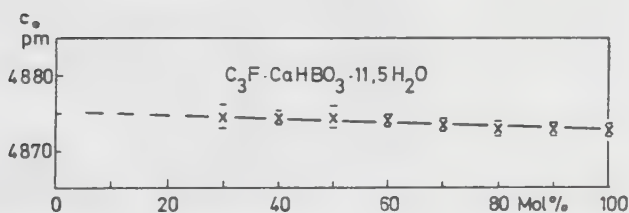


Abb. 126 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System $C_3F \cdot Ca(OH)_2 \cdot nH_2O - C_3F \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ bei $20^\circ C$ und 100 % r.F.

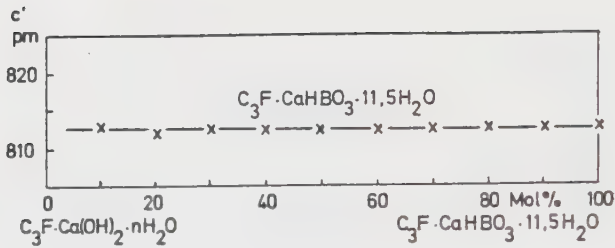


Abb. 127 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3F.Ca(OH)_2.nH_2O - C_3F.CaHBO_3.11,5H_2O$ bei $20^\circ C$ und 35 % r.F.

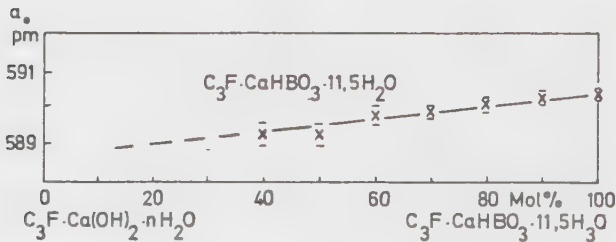
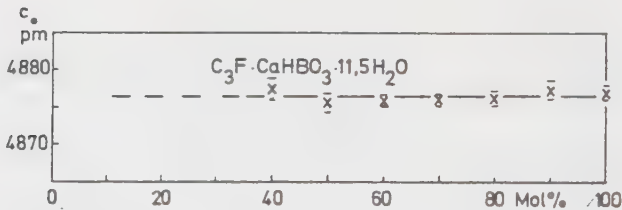


Abb. 128 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System $C_3F.Ca(OH)_2.nH_2O - C_3F.CaHBO_3.11,5H_2O$ bei $20^\circ C$ und 35 % r.F.

3.2.2. Untersuchung von $C_3F.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ Fe - Monoborat

Durch Reaktion von C_2F , H_3BO_3 und H_2O läßt sich die zu Al - Monoborat analoge Fe - Verbindung darstellen. Im Gegensatz zu $C_3A.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ findet sich bei $C_3F.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ auch auf Guinieraufnahmen keine Aufspaltung der Reflexe. Unter Annahme einer Sechsschichtstruktur ist eine rhomboedrische Indizierung möglich.

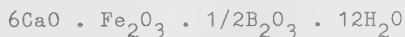


Bild 40 :

Kristalle von
 $C_3F.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$
 REM - Aufnahme

Für mikroskopische Untersuchungen sind die Kristalle zu klein; Abbildungen sind nur mit dem REM möglich.

Die chemische Analyse (Tab. 38) ergibt die Oxidformel



In struktureller Schreibweise entspricht dies:



Die H_2O der Zwischenschicht werden in zwei kurz aufeinanderfolgenden Stufen abgegeben. Ab $130^\circ C$ beginnt die Hauptschicht zu zerfallen. (Abb. 129 und 130).

	Gew. % gem.	Gew. % ber.
CaO	35,3	35,3
Fe ₂ O ₃	24,4	25,2
B ₂ O ₃	5,9	5,5
H ₂ O	33,0	34,0
	<u>98,6</u>	<u>100,0</u>

Tab. 39 : Chemische Analyse von $C_3F.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$

Die Bindung des H₂O in den niedrigeren Hydratstufen muß relativ locker sein, da die Basisabstände innerhalb des Existenzbereiches der Hydrate deutlich absinken. Die Verbindung ist also wesentlich instabiler als ihr Al - Analogon.

Tab. 40 faßt die Ergebnisse der Entwässerungsversuche zusammen.

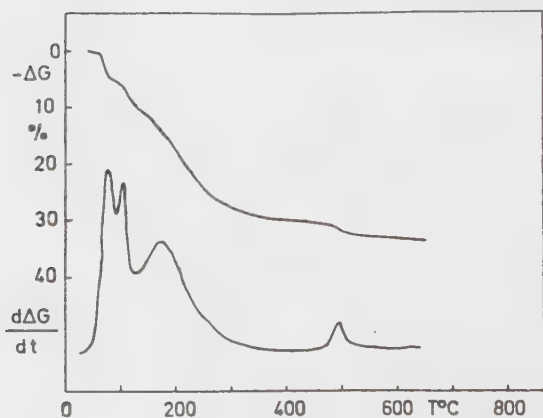


Abb. 129 :

TG - Aufnahme von
 $C_3F.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$

R : 1°/min (TG)

10°/min (DTG)

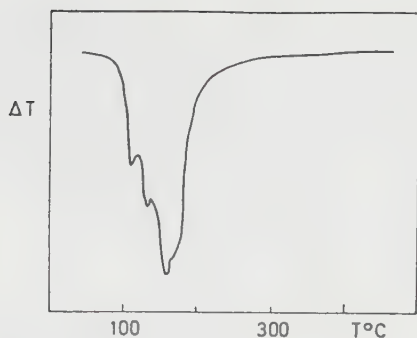


Abb. 130 :

DSC - Aufnahme von
 $C_3F.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$

R : $10^\circ/\text{min}$

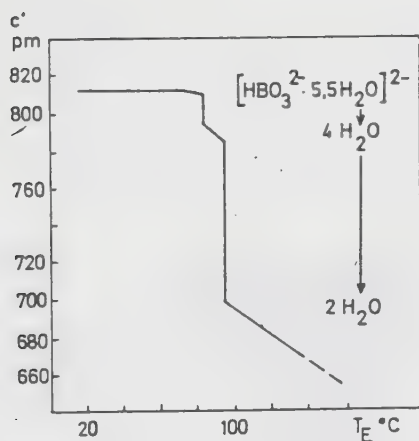


Abb. 131 :

Entwässerung von
 $C_3F.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$
 in der Röntgen-
 heizkammer

T °C	Gew.verlust %	Rest H_2O ges.	Zwischenschicht	c' pm
20	0	12	$HBO_3 \cdot 5,5 H_2O$	813
80	4,1	10,5	$HBO_3 \cdot 4 H_2O$	794-780
90	9,6	8,5	$HBO_3 \cdot 2 H_2O$	702-669
180	30,3	1	-	-
480	33	0	-	-
1100	33	0	-	-

Tab. 40 : Entwässerung von $C_3F.CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$

Das IR - Spektrum enthält OH-, H₂O- und BO₃ - Schwingungen. An die Stelle der AlO₆ - Banden treten beim C₃F.CaHBO₃.11,5H₂O die FeO₆ - Schwingungen. Die ν₃ - BO₃ - Schwingung zeigt bei 1465 cm⁻¹ eine Schulter, die möglicherweise von einer röntgenographisch nicht mehr erkennbaren Symmetrierniedrigung verursacht sein könnte.

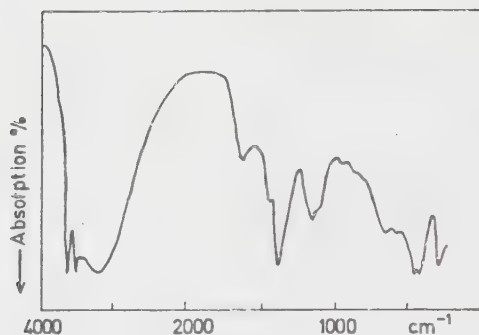


Abb. 131 :

IR - Spektrum von
C₃F.CaHBO₃.11,5H₂O

Wellenzahl cm ⁻¹	Zuordnung
3640	OH Valenz
3540	H ₂ O ν ₁ /ν ₃
3300 - 3000	H ₂ O ν ₁ /ν ₃
1625	H ₂ O ν ₂
1465 (sh)	BO ₃ ν ₃
1410	BO ₃ ν ₃
660	Fe(OH) ₆ / FeO ₆
580	Fe(OH) ₆ / FeO ₆
425	Ca-O
300	Ca-O

Tab. 41 : IR - Spektrum von C₃F.CaHBO₃.11,5H₂O

3.2.3. System $C_3F.CaHBO_3.11,5H_2O - C_3F.CaCl_2.10H_2O$

Das System $C_3F.CaHBO_3.11,5H_2O - C_3F.CaCl_2.10H_2O$ wurde untersucht, da die Ergebnisse des Al - Analogons hier die größten Änderungen erwarten ließen.

Die Einwaagen wurden nach der Formel berechnet:



$C_3F.CaHBO_3.11,5H_2O$ ist bis ca. 17 Mol % Fe- Monochlorid nachweisbar. Chlorid wird quantitativ in einem Mischkristall $C_3F.(1-x)CaHBO_3.xCaCl_2.(11,5-2x)H_2O$ mit $0,17 \leq x \leq 1$ gebunden, dessen Gitterkonstanten zum $C_3F.CaCl_2.10H_2O$ hin abnehmen. Die Sechsschichtstruktur mit rhomboedrischer Symmetrie geht bei 83 Mol % Fe- Monochlorid über in eine Dreischichtstruktur. Am Verschwinden des Reflexes 119 ist dies eindeutig nachweisbar.

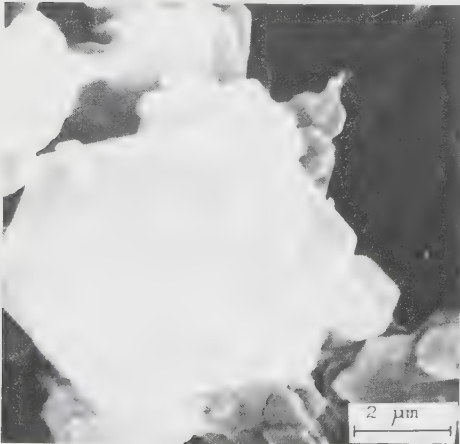


Bild 41 :
Mischkristalle
im System
 $C_3F.CaHBO_3.11,5H_2O -$
 $C_3F.CaCl_2.10H_2O$
REM - Aufnahme

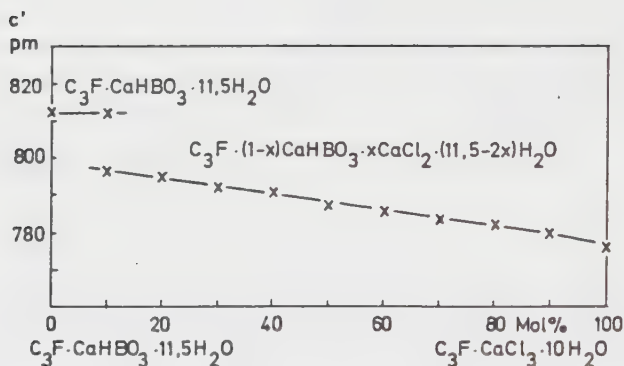


Abb. 132 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3F \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ - $C_3F \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$ bei $20^\circ C$ und 100 % r.F.

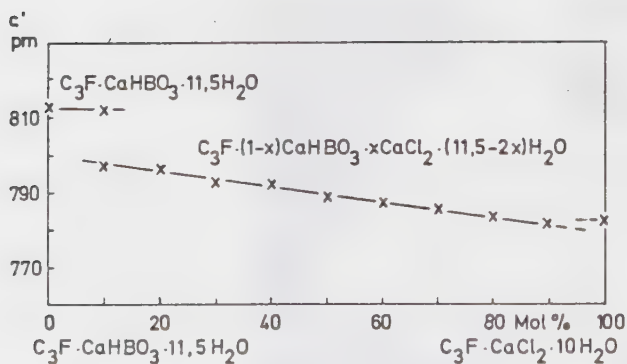


Abb. 133 : Schichtdicken c' der Bodenkörper im System $C_3F \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ - $C_3F \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$ bei $20^\circ C$ und 35 % r.F.

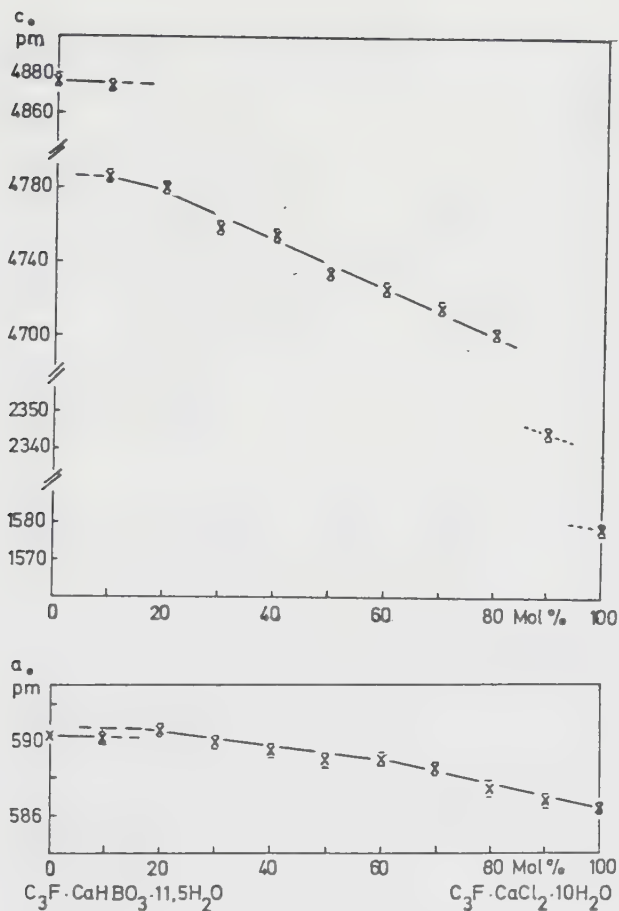


Abb. 134 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3F \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3F \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$
 bei 20°C und 100 % r.F.

$C_3F \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$ kann bei 100 % r.F. nicht rhomboedrisch indiziert werden; wahrscheinlich liegt eine monokline Zweischichtstruktur vor, die beim Trocknen auf 35 % r.F.

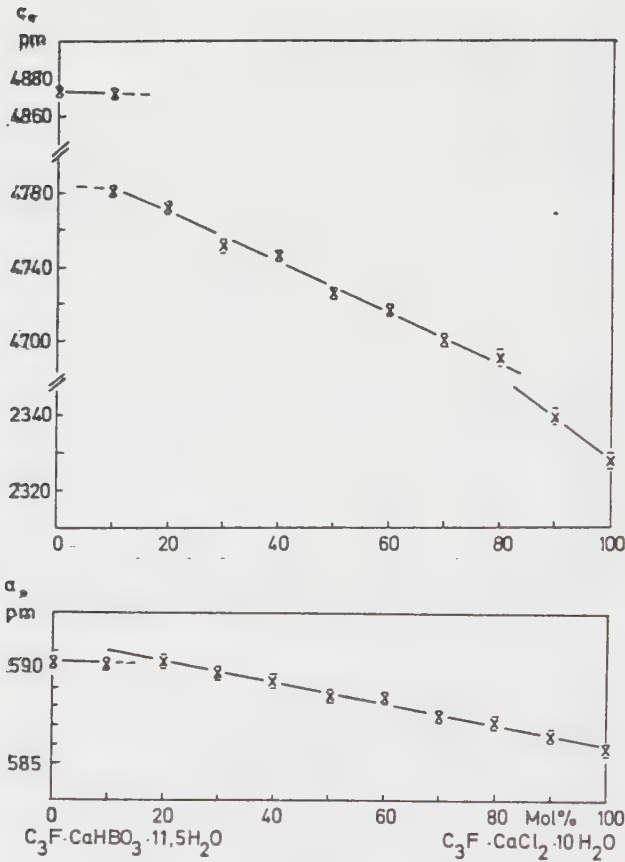


Abb. 135 : Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $C_3F \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O - C_3F \cdot CaCl_2 \cdot 10H_2O$
 bei $20^\circ C$ und 35 % r.F.

in die rhomboedrische Dreischichtstruktur übergeht. Aus diesem Grund fehlt im Gegensatz zu den Al - Verbindungen in den DSC - Aufnahmen des Systems (Abb. 136) der Peak der Phasen-

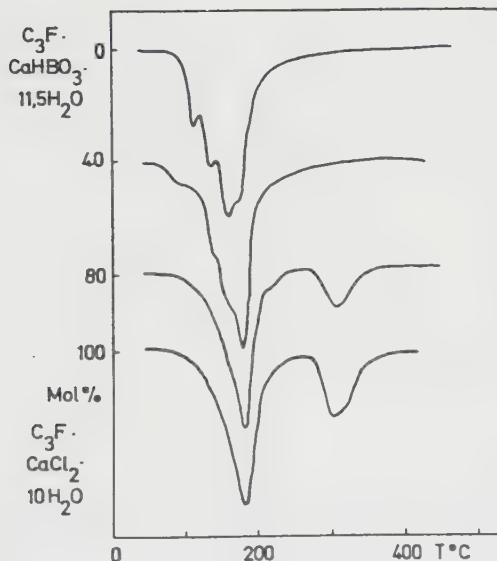
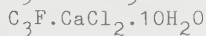


Abb. 136 :

DSC - Diagramme
im System



R : $10^\circ/min$

umwandlung, da mit Proben von 35 % r.F. gearbeitet wurde. Abb. 136 zeigt, wie sich das Entwässerungsverhalten der Mischkristalle mit steigendem Cl - Gehalt vereinfacht. Als Beispiel ist die Dehydratation eines Mischkristalls $C_3F \cdot 0,5CaHBO_3 \cdot 0,5CaCl_2 \cdot 10,75H_2O$ in der Röntgenheizkammer aufgezeichnet (Abb. 137).

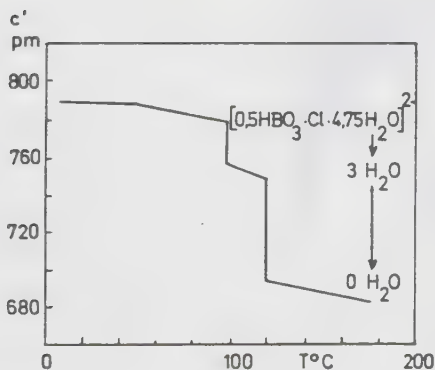


Abb. 137 :

Dehydratation eines

Mischkristalls aus dem



Röntgenheizkammer

T °C	Gew. verlust %	Rest H ₂ O ges.	Zwischenschicht	c' pm
20	0	11	0,5HBO ₃ .Cl.4,75H ₂ O	789-780
100	5,2	9,25	0,5HBO ₃ .Cl.3 H ₂ O	756
120	13,3	6,25	0,5HBO ₃ .Cl.0 H ₂ O	689
ab 190			Zerstörung der Hauptschicht	
850	31,3	0	beginnende Cl - Verluste	

Tab. 42 : Entwässerung eines Mischkristalls (x=0,5) aus dem System C₃F.CaHBO₃.11,5H₂O - C₃F.CaCl₂.10H₂O

3.2.4. Untersuchung von C₃F.CaCl₂.10H₂O Fe - Monochlorid

Zu Vergleichszwecken wurde C₃F.CaCl₂.10H₂O in dieser Arbeit aus C₂F dargestellt und nicht, wie üblich, aus löslichen Fe - Salzen.

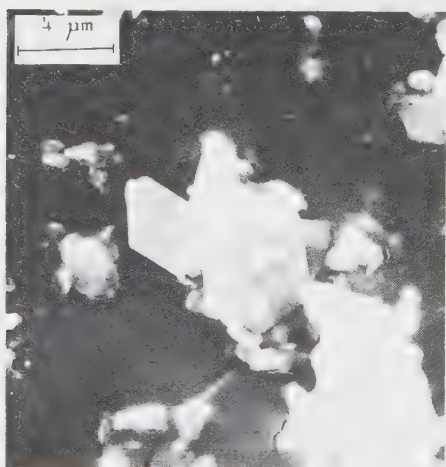
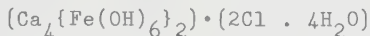


Bild 42 :
Kristalle von
C₃F.CaCl₂.10H₂O
REM - Aufnahme

Bei 35 % r.F. besitzt die Verbindung eine rhomboedrische Dreischichtstruktur (KUZEL 1968 und 1969).

Die chemische Analyse (Tab. 43) ergibt die Formel:



	Gew. % gem.	Gew. % ber.
CaO	33,9	33,8
Fe ₂ O ₃	26,0	25,8
Cl ₂	11,4	11,3
H ₂ O	28,9	29,1
	100,2	100,0

Tab. 43 : chemische Analyse von $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$

Die thermische Analyse zeigt, daß die vier H_2O der Zwischenschicht in einer einzigen Stufe abgegeben werden. Diese setzt bereits bei niedrigen Temperaturen mit einem kontinuierlichen H_2O - Verlust ein; KUZEL (1969) schließt daraus, daß die vier H_2O nicht gleichwertig sind.

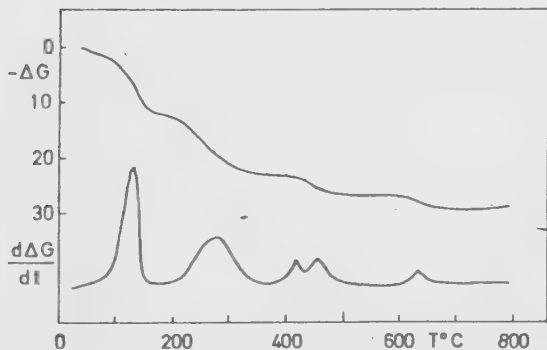


Abb. 138 :
TG - Aufnahme von
 $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
R : 1°/min (TG)
10°/min (DTG)

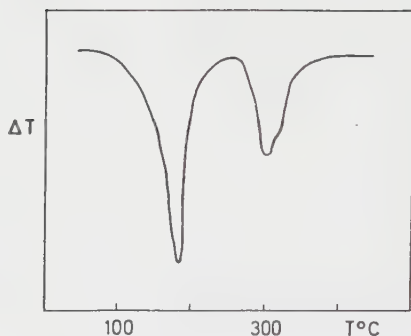


Abb. 139 :
DSC - Aufnahme von
 $C_3F.CaCl_2.10H_2O$
R : $10^\circ/min$

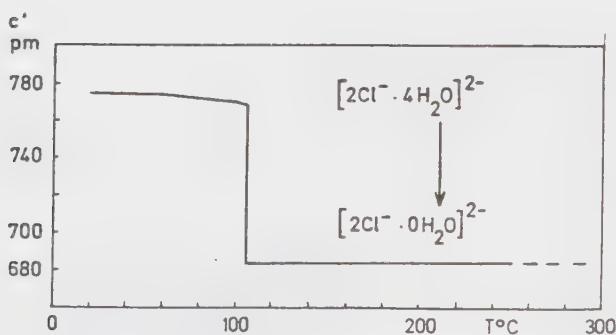


Abb. 140 : Entwässerung von $C_3F.CaCl_2.10H_2O$ in der Röntgenheizkammer

Bei ca. $250^\circ C$ wird $C_3F.CaCl_2.6H_2O$ röntgenamorph durch Zerstörung der Hauptschicht.

Tab. 44 faßt das thermische Verhalten zusammen.

Im IR - Spektrum erkennt man bei 1420 cm^{-1} die durch die Carbonatisierung während der Reaktionszeit und bei der Präparation verursachte $\nu_3\text{-CO}_3$ -Schwingung.

T °C	Gew.verlust %	Rest H ₂ O ges.	Zwischenschicht	c' pm
20	0	10	2Cl.4H ₂ O	775-772
105	12,0	6	2Cl.OH ₂ O	685
270	23,0	2	Zerstörung der Hauptschicht	
460-510	27,3	1-0,5		
640	29,6	0		

Tab. 44 : Entwässerung von C₃F.CaCl₂.10H₂O

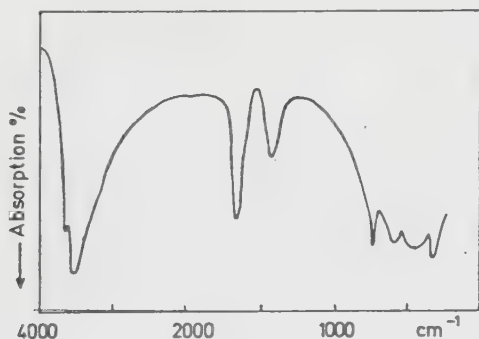


Abb. 141 :
IR - Spektrum von
C₃F.CaCl₂.10H₂O

Wellenzahl cm ⁻¹	Zuordnung
3670	OH Valenz
3650-3400	H ₂ O v ₁ /v ₃
1650	H ₂ O v ₂
1420	CO ₃ v ₃ (Carbonatisierung)
740	Fe(OH) ₆
575	FeO ₆
490-475	Ca-O
330	Ca-O

Tab. 45 : IR - Spektrum von C₃F.CaCl₂.10H₂O

4. ZUSAMMENFASSUNG UND DISKUSSION

Der normale Hydratationsablauf des Zements kann durch Zusatzmittel verändert werden, wenn die äußeren Umstände seiner Verwendung dies erfordern. Ohne Kenntnisse der zugrundeliegenden Kristallchemie sind jedoch vor allem bei der Kombination von Stoffen unerwünschte gegenteilige Effekte möglich. Berücksichtigt werden müssen auch mögliche Veränderungen des Stoffbestandes durch spätere Umwelteinflüsse.

Über die Wirkung von Borverbindungen auf Tonerde- und Portlandzemente existieren mehrere zum Teil widersprüchliche Veröffentlichungen, ohne daß bisher ein Verständnis der zugrundeliegenden Vorgänge erreicht worden wäre.

Aufgabe der vorliegenden Arbeit sollte es deshalb sein, die Kristallchemie der Verbindungen aufzuzeigen, die bei der Verwendung von Boraten als Zementzusatz entstehen können. Untersucht wurden die Beziehungen borathaltiger Calciumaluminat- und Calciumferrithydrate zu den OH^- , Cl^- , SO_4^{2-} und CO_3^{2-} haltigen Verbindungen dieses Typs.

Da Temperaturänderungen Verschiebungen der Stabilitätsbereiche bewirken, müssen die Systeme bei verschiedenen Temperaturen untersucht werden. Die große CO_2 - Empfindlichkeit der Proben erfordert von der Präparation bis zur Untersuchung Schutzgasatmosphäre.

Das bei Anwesenheit von B_2O_3 im Zement sich bildende laminare $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ oder $\text{C}_4\text{A} \cdot 1/2\text{B}_2\text{O}_3 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ mit der Strukturformel $(\text{Ca}_4\{\text{Al}(\text{OH})_6\}_2) \cdot (\text{HBO}_3 \cdot 5,5\text{H}_2\text{O})$ ist mit $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ unmischbar. Bei Raumtemperatur ist die Verbindung monoklin Cc oder C 2/c und geht bei 35 % r.F. und 60°C allochemisch und irreversibel in eine rhomboedrische Modifikation über. Bei weiterer Temperaturerhöhung werden Hydratphasen mit 11, 10, 7-8 und 6 H_2O (gesamt) beobachtet. Über 200°C wird die Struktur zerstört.

In der Ebene der Zwischenschicht des $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$ liegen planare HBO_3^{2-} - Gruppen. Die monoklinen Kristalle zeigen unter gekreuzten Polarisatoren radiale, optisch zweiachsig negative Sektoren; die rhomboedrischen Kristalle sind optisch homogen und einachsig negativ. Die Sektoren der monoklinen Tieftemperaturmodifikation könnten durch Verzwillingung oder Verspannung der Struktur hervorgerufen worden sein.

Mit $C_3A.CaCl_2.10H_2O$ bildet $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$ rhomboedrische Mischkristalle

$[Ca_4\{Al(OH)_6\}_2] \cdot ((1-x)HBO_3 \cdot 2xCl \cdot (5,5-1,5x)H_2O)$ mit $0,17 \leq x \leq 1$. Bei $x=0,83$ ändert sich die Symmetrie von rhomboedrisch nach monoklin. Mit steigendem Cl - Gehalt vereinfachen sich Zwischenschicht und damit Dehydratationsverhalten der Mischkristalle.

Im System $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O - C_3A.CaSO_4.nH_2O$ liegen Monoborat und ein sulfatreicher Grenzmischkristall der Zusammensetzung $[Ca_4\{Al(OH)_6\}_2] \cdot ((1-x)HBO_3 \cdot xSO_4 \cdot nH_2O)$ mit $x=0,83$ nebeneinander vor. Bei höheren SO_4^{2-} - Gehalten ändert der Mischkristall seine Zusammensetzung entsprechend der angegebenen Formel. Im Grenzmischkristall stabilisiert die HBO_3^{2-} - Gruppe bei $20^\circ C$ im Kontakt mit der Mutterlauge die höchste Hydratstufe mit $16 H_2O$; bei $40^\circ C$ liegt das 14 - Hydrat vor.

Die carbonathaltigen laminaren Calciumaluminathydrate $C_3A.O,5CaCO_3.O,5Ca(OH)_2.11,5H_2O$ und $C_3A.CaCO_3.11H_2O$ bilden mit $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O$ Mischkristalle, deren Symmetrie sich in beiden Fällen bei einer Zwischenschichtbesetzung von

$< 2/3 HBO_3^{2-}$ von monoklin nach rhomboedrisch ändert.

Die Mischbarkeit von Monoborat und Halbcarbonat ist vollkommen:

$[Ca_4\{Al(OH)_6\}_2] \cdot ((1-x)HBO_3 \cdot 0,5xCO_3 \cdot xOH \cdot 5,5H_2O)$ mit $0 \leq x \leq 1$.

Bei Temperaturerhöhung tritt Halbcarbonat zugunsten von Monocarbonat zurück. Die durch die Bildung des $C_3A.CaCO_3.11H_2O$ gebundenen CO_3^{2-} - Anionen werden im Mischkristall durch OH^- ersetzt.

Im System $C_3A.CaHBO_3.11,5H_2O - C_3A.CaCO_3.11H_2O$ bilden sich bei $20^\circ C$ Mischkristalle

$(\text{Ca}_4\{\text{Al}(\text{OH})_6\}_2) \cdot ((1-x)\text{HBO}_3 \cdot x\text{CO}_3 \cdot (11,5+2x)\text{H}_2\text{O})$ mit $0 \leq x \leq 0,67$
 Im carbonatreichen Teil des Systems koexistieren der Grenz-
 mischkristall ($x=0,67$) und $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$. Mit steigender
 Temperatur vergrößert sich der Stabilitätsbereich von Mono-
 carbonat, so daß in die Mischkristalle zusätzlich OH^- ein-
 gebaut werden muß.

Um exakte Aussagen zu beiden Systemen machen zu können, müßte
 eine Untersuchung des Dreistoffsystems TCAH - Monocarbonat -
 Monoborat bei 20, 40 und 60°C erfolgen. Mit den bisher vor-
 liegenden Ergebnissen kann jedoch abgeschätzt werden, welche
 Phasen in diesem Dreistoffsystem zu erwarten sind (Abb. 142).

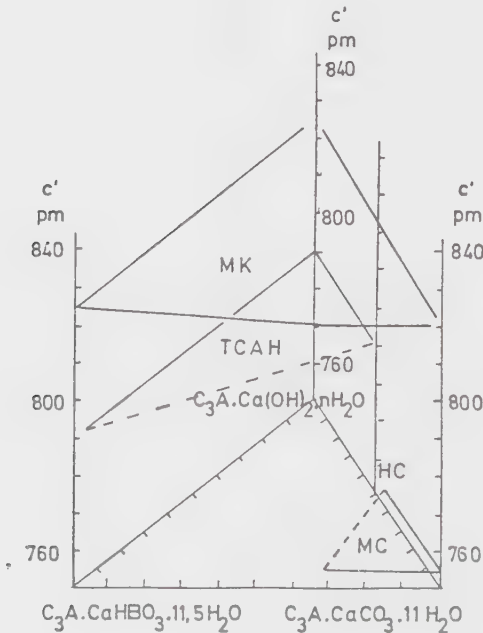


Abb. 142 : Zu erwartende Stabilitätsgebiete im Dreistoffsystem
 $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ - $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$ -
 $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ bei 20°C

MC : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$ TCAH : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$
 HC : $\text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
 MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot x\text{CaHBO}_3 \cdot y\text{CaCO}_3 \cdot z\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ mit $x+y+z=1$

Im ganzen System treten Mischkristalle auf, deren Zwischenschicht mit HBO_3^{2-} , CO_3^{2-} und OH^- besetzt ist. Die Stabilitätsgrenzen für TCAH und $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$ können bis jetzt nur vermutet werden; sie sind in Abb. 142 gestrichelt. Bei höheren Temperaturen weitet sich das Feld des Monocarbonats aus, die Mischkristalle werden OH - reicher und TCAH zerfällt in C_3AH_6 und CH.

Analogien zu den Al - Systemen zeigen die bisher untersuchten Fe - haltigen Systeme.

Im System $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ bleibt die Zusammensetzung des $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ konstant; die Darstellung von $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ gelingt nicht. Fe - Monoborat kann bereits bei Raumtemperatur rhomboedrisch indiziert werden. Die Verbindung ist thermisch instabiler als ihr Al - Analogon.

Der Einbau von Cl^- in $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ folgt denselben Gesetzen wie in den Al - haltigen Systemen. Bei Cl - Gehalten der Mischkristalle von $> 83 \text{ Mol}\%$ Fe - Monochlorid halbiert sich die Periode der Überstruktur von sechs auf drei. Die Phasentransformation des Monochlorids von monoklin nach rhomboedrisch findet bereits beim Trocknen auf 35% r.F. statt.

In Abhängigkeit von der Art der Darstellung werden zwei verschiedene Boratettringite gefunden:

- a) $\{\text{Ca}_6\{\text{Al}(\text{OH})_6\}_2 \cdot 24\text{H}_2\text{O}\} \cdot (2 \text{ B}(\text{OH})_4 \cdot 4 \text{ OH} \cdot 6 \text{ H}_2\text{O})$
- b) $\{\text{Ca}_6\{\text{Al}(\text{OH})_6\}_2 \cdot 24\text{H}_2\text{O}\} \cdot (4 \text{ B}(\text{OH})_4 \cdot 2 \text{ OH})$

Es gelingt nicht, alle Anionenplätze der Struktur mit $\text{B}(\text{OH})_4^-$ zu besetzen.

Nach der Saccharatmethode können zwei weitere, anders nicht darstellbare Ettringite synthetisiert werden:

- a) $\{\text{Ca}_6\{\text{Al}(\text{OH})_6\}_2 \cdot 24\text{H}_2\text{O}\} \cdot (6 \text{ OH} \cdot 3 \text{ H}_2\text{O})$
- b) $\{\text{Ca}_6\{\text{Al}(\text{OH})_6\}_2 \cdot 24\text{H}_2\text{O}\} \cdot (3 \text{ CO}_3 \cdot 2 \text{ H}_2\text{O})$

Sulfatettringit $(\text{Ca}_6\{\text{Al}(\text{OH})_6\}_2 \cdot 24\text{H}_2\text{O}) \cdot (3 \text{SO}_4^{2-} \cdot 0-6 \text{H}_2\text{O})$ läßt sich nach beiden verwendeten Methoden darstellen; die Synthese nach dem Saccharatverfahren begünstigt den höheren H_2O - Gehalt.

Die Existenz eines reinen Chloridettringits kann nicht bestätigt werden; beobachtet wird nur ein geringer Einbau von ca. 0,7 % Gew. Cl_2 , entsprechend der ungefähren Formel $(\text{Ca}_6\{\text{Al}(\text{OH})_6\}_2 \cdot 24\text{H}_2\text{O}) \cdot (5,75 \text{OH}^- \cdot 0,25 \text{Cl}^- \cdot n \text{H}_2\text{O})$. Eine Stabilisierung durch $\text{B}(\text{OH})_4^-$ in Analogie zu SO_4^{2-} ist nicht möglich.

Die mittels der Saccharatmethode dargestellten Ettringit-systeme werden kompliziert durch die inkongruente Kristallisation der Präzipitate: die Bodenkörper weisen eine andere Zusammensetzung als die Einwaage auf. Die Anionen sind quantitativ im Festkörper gebunden, Ca^{2+} und Al^{3+} bleiben jedoch teilweise in Lösung. Die Änderung der chemischen Zusammensetzung im System erfolgt damit nicht linear; jeder Bodenkörper muß chemisch analysiert werden. Die nach der Saccharatmethode untersuchten Systeme sind anhand ihres Anionenaustausches nachfolgend zusammengestellt.

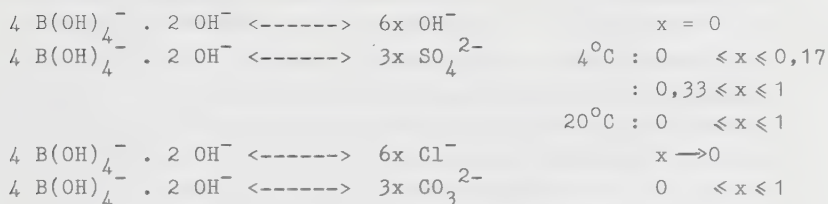
6OH^-	$\langle \text{-----} \rangle$	$2x \text{B}(\text{OH})_4^- \cdot 4x \text{OH}^-$	$0,7 \leq x \leq 1$
6OH^-	$\langle \text{-----} \rangle$	$3x \text{SO}_4^{2-}$	$0,5 \leq x \leq 1$
6OH^-	$\langle \text{-----} \rangle$	$6x \text{Cl}^-$	$0 \leq x \leq 0,04$
$2 \text{B}(\text{OH})_4^- \cdot 2 \text{OH}^-$	$\langle \text{-----} \rangle$	$3x \text{SO}_4^{2-}$	$0 \leq x \leq 1$
$2 \text{B}(\text{OH})_4^- \cdot 2 \text{OH}^-$	$\langle \text{-----} \rangle$	$6x \text{Cl}^-$	$0 \leq x \leq 0,04$
$2 \text{B}(\text{OH})_4^- \cdot 2 \text{OH}^-$	$\langle \text{-----} \rangle$	$3x \text{CO}_3^{2-}$	$0 \leq x \leq 0,83$

Im System $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}\{\text{B}(\text{OH})_4\}_2 \cdot 2\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 36\text{H}_2\text{O}$ wird bei geringstem B_2O_3 - Angebot ein Ettringit mit ungefähr $4/3 \text{B}(\text{OH})_4^-$ in den Kanälen stabil, während der Austausch von SO_4^{2-} gegen OH^- mit $1,5 \text{SO}_4^{2-}$ beginnt

Im System $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}\{\text{B}(\text{OH})_4\}_2 \cdot 2\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 36\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 36\text{H}_2\text{O}$ werden zunächst 3OH^- durch $1,5 \text{SO}_4^{2-}$ ersetzt, erst dann beteiligt sich $\text{B}(\text{OH})_4^-$ merklich am Austausch.

Ähnlich verhält sich das System $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 36H_2O - C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot 32H_2O$, bei dem im Bereich von 0 bis 10 Mol % Carbonatettringit $4 OH^-$ quantitativ durch $2 CO_3^{2-}$ ersetzt werden; bis 83 Mol % Carbonatettringit erfolgt dann der Austausch $1 B(OH)_4^- \longleftrightarrow 0,5 CO_3^{2-}$.

Von den konventionell aus Oxiden darstellbaren Ettringiten können nur $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ und $C_3A \cdot 3CaSO_4 \cdot 30H_2O$ in reiner Form synthetisiert werden. Dies hat zur Folge, daß in allen anderen Systemen Nebenphasen auftreten, die eine chemische Analyse der Ettringite verhindern. Schlüsse können dann nur aus dem Verlauf der Gitterkonstanten gezogen werden. Der Austausch in diesen Systemen ist nachfolgend zusammengestellt.



Als Begleitphasen treten außer in den sulfathaltigen Systemen die entsprechenden laminaren Verbindungen auf. Im System $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O - C_3A \cdot 3CaCO_3 \cdot nH_2O$ erscheinen bei hohen Carbonatgehalten zusätzlich Calcit und $C_3A \cdot CaCO_3 \cdot 11H_2O$.

Einfache kristallchemische Regeln lassen sich aus diesen Untersuchungen nicht ableiten. Im Zusammenhang mit den Ergebnissen anderer Autoren (KUZEL 1969, BUHLERT 1971, PÜLLMANN 1984) sind jedoch gewisse Gesetzmäßigkeiten zu erkennen. Bei den laminaren Verbindungen treten, wie KELLER (1971) und PÜLLMANN (1980 u. 1984) feststellten, Änderungen der Eigenschaften fast immer bei Werten von $n/6$ auf ($1 \leq n \leq 6$). Diese Tatsache deutet auf geordnete Zwischenschichten bei den $n/6$ - Grenzen hin.

Der Ersatz von Al^{3+} durch Fe^{3+} und Cr^{3+} ruft eine Dehnung der Struktur in Richtung der a - Achse und eine Verkürzung in Richtung von c hervor. Die $\text{Me}(\text{OH})_6$ - Oktaeder sind in der Ebene der Hauptschicht enger benachbart als senkrecht dazu; die Effekte müssen sich daher in Richtung der a - Achse am deutlichsten bemerkbar machen. Calciumferrithydrate sind instabiler als ihre Al - Analoga. Vermutlich liegt dem die geringere Bindungsstärke des Fe^{3+} zugrunde.

Bor kann gegenüber Sauerstoff die Koordinationen drei und vier annehmen. In laminaren Calciumaluminathydraten ist Bor dreifach koordiniert, während in Ettringiten die Koordinationszahl vier bevorzugt wird. Letzteres äußert sich auch darin, daß sich Ettringite mit Anionenkoordinationen kleiner als vier generell schwieriger darstellen lassen als zum Beispiel SO_4^{2-} oder $\text{B}(\text{OH})_4^-$ - Ettringit.

Calciumaluminathydrate mit HBO_3^{2-} und CO_3^{2-} in der Zwischenschicht bilden untereinander und mit der Cl - haltigen Verbindung Mischkristalle, solange die Anionen kristallographisch gleiche Positionen besetzen. Triklines $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$ zeigt deshalb keine Mischbarkeit mit anderen Calciumaluminathydraten. Zwischen Verbindungen mit XO_3 - und XO_4 - Gruppen (HBO_3^{2-} , CO_3^{2-} bzw. SO_4^{2-}) ist nur beschränkte Mischbarkeit oder die Bildung intermediärer Verbindungen zu beobachten.

TCAH bildet mit keinem der Calciumaluminathydrate, die trigonal planare oder tetraedrische Anionen enthalten, Mischkristalle. Andererseits ist der Einbau von OH^- in viele dieser Verbindungen möglich.

Die Symmetrie der meisten Calciumaluminathydrate ist nur pseudohexagonal. Hochauflösende Röntgenaufnahmen oder IR - Spektren weisen auf niedrigere monokline oder triklin Symmetrie hin.

Die Hohlraumzusammensetzung der Boratettringite aus $\text{B}(\text{OH})_4^-$ und OH^- kompliziert die Formulierung des Austausches und der kristallchemischen Gesetzmäßigkeiten.

Aus der Gruppe der Ettringite, in denen einwertige Anionen alle verfügbaren Anionenplätze besetzen, können nur

$C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 32H_2O$ und $C_3A \cdot 3Ca(NO_3)_2 \cdot 32H_2O$ ohne Beteiligung anderer Anionen dargestellt werden. Der Platzbedarf der $B(OH)_4^-$ -Anionen ist offenbar bereits so groß, daß eine Besetzung mit 6 $B(OH)_4^-$ - Tetraedern nicht mehr möglich ist. Statt dessen sind Teilbesetzungen der Anionenplätze mit zwei bzw. vier $B(OH)_4^-$ realisiert.

Möglicherweise sind auch beim Chloridettringit, dessen Darstellung nicht gelang, sterische Gründe ausschlaggebend. $C_3A \cdot 3Ca(OH)_2 \cdot 32H_2O$ ist gegenüber allen anderen Anionen äußerst instabil. Im Laufe der Zeit werden auch alle OH^- , die beim Austausch anderer Anionen beteiligt sind, durch CO_3^{2-} ersetzt.

Der gegenseitige Ersatz zweier XO_4^- - Anionen und der Austausch $XO_3^- \longleftrightarrow XO_4^-$ läßt keine Regeln erkennen; sowohl vollständige Mischbarkeit als auch Mischungslücken sind in beiden Fällen realisiert.

Hinsichtlich der Dehydratation zeigen alle Ettringite Gemeinsamkeiten. Der Wassergehalt in den Kanälen liegt zwischen maximal 6 und minimal 0 H_2O ; der tatsächliche H_2O - Gehalt ist von äußeren Faktoren abhängig. Werden die H_2O des Gerüsts entfernt, bricht die Struktur zusammen.

Aus diesen Ergebnissen können einige Folgerungen für die praktische Verwendung von Boraten im Zement gezogen werden. Borate werden nur in laminare Tetracalciumaluminathydrate und in Ettringite eingebaut. Im Tonerdezement können bei Anwesenheit von genügend CaO die Verbindungen $C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5H_2O$ und $C_3A \cdot Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot 2Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ bzw. Mischkristalle mit anderen vorhandenen Calciumaluminathydraten gebildet werden. Die Entstehung von C_3AH_6 kann dadurch zurückgedrängt werden; von einer Stabilisierung des CAH_{10} im Sinne der Offenlegungsschrift 1 771 911 kann jedoch nicht gesprochen werden. Die Stabilitätsgebiete der laminaren Borverbindung und des Boratettringits sind genauso eng benachbart wie die der sulfathaltigen Calciumaluminathydrate. PLOWMAN und CABRERA (1984) erklären die Verzögerungswirkung des SO_4^{2-} im Port-

landzement durch die Bildung einer Schicht laminarer sulfathaltiger Hydrate über den C_3A - Körnern, auf der eine Ettringithülle das Wasser der unmittelbaren Kornumgebung bindet und so das C_3A an der Reaktion hindert. Die verzögernde Wirkung von Boraten könnte ähnlich begründet sein. Vor allem die Kombination von SO_4^{2-} und $B(OH)_4^-$ bzw. HBO_3^{2-} sollte durch die Bildung der höchsten Hydratstufe der laminaren Verbindung und der wasserreichen Ettringite verzögernd wirken. Die Berechnung einer B_2O_3 - Zugabe muß daher im Einklang mit dem Sulfatgehalt des Zements stehen, da sonst Abbindestörungen zu erwarten sind.

Nach dieser Theorie kann auch die beschleunigende Wirkung des Cl^- und des CO_3^{2-} erklärt werden. Chloridettringit wird praktisch nicht gebildet; die Anwesenheit von Cl^- drängt, wie am Beispiel des $C_3A \cdot 2Ca\{B(OH)_4\}_2 \cdot Ca(OH)_2 \cdot 30H_2O$ gezeigt wird, die Bildung von Ettringiten zugunsten der laminaren Verbindungen zurück. Die Bildung carbonathaltiger Ettringite ist zwar möglich; steigender CO_3^{2-} - Gehalt begünstigt jedoch auch laminare Verbindungen. Die C_3A - Körner werden damit kaum an ihrer schnellen Hydratation gehindert.

Unter den Bedingungen der Praxis komplizieren eine Vielzahl von weiteren Ionen und äußeren Einflüssen die Wirkung der Zusatzmittel. Zum vollen Verständnis der Vorgänge sind daher weitere Untersuchungen notwendig.

5. TABELLEN

5.1. Gitterkonstanten der Bodenkörper

5.2. Indizierungen der untersuchten Verbindungen

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Molverh.

$\text{HBO}_3^{2-}/\text{Al}_2\text{O}_3$

0	TCAH			$c': 1067 \text{ pm}$
0.1	TCAH			$c': 1067 \text{ pm}$
	MB			$c': 825.6 \text{ pm}$
0.2	TCAH			$c': 1067 \text{ pm}$
	MB			$c': 825.5 \text{ pm}$
0.3	TCAH			$c': 1067 \text{ pm}$
	MB			$c': 825.9 \text{ pm}$
0.4	TCAH			$c': 1067 \text{ pm}$
	MB	$a_o: 1001.3 \pm 15 \text{ pm}$ $b_o: 576.7 \pm 4 \text{ pm}$	$c_o: 1684.3 \pm 4 \text{ pm}$ $\beta: 101.25 \pm 0.05^\circ$	$c': 825.9 \text{ pm}$
0.5	TCAH			$c': 1067 \text{ pm}$
	MB	$a_o: 1000.8 \pm 6 \text{ pm}$ $b_o: 576.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_o: 1683.8 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.36 \pm 0.03^\circ$	$c': 825.4 \text{ pm}$
0.6	TCAH			$c': 1067 \text{ pm}$
	MB	$a_o: 1000.1 \pm 7 \text{ pm}$ $b_o: 576.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_o: 1683.9 \pm 2 \text{ pm}$ $\beta: 101.23 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.8 \text{ pm}$
0.7	TCAH			$c': 1067 \text{ pm}$
	MB	$a_o: 1000.4 \pm 4 \text{ pm}$ $b_o: 576.4 \pm 4 \text{ pm}$	$c_o: 1684.3 \pm 4 \text{ pm}$ $\beta: 101.26 \pm 0.03^\circ$	$c': 825.9 \text{ pm}$
0.8	TCAH			$c': 1066 \text{ pm}$
	MB	$a_o: 1000.3 \pm 4 \text{ pm}$ $b_o: 576.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_o: 1684.5 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.34 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.8 \text{ pm}$
0.9	MB	$a_o: 1000.7 \pm 3 \text{ pm}$	$c_o: 1684.4 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 825.6 \text{ pm}$
		$b_o: 576.4 \pm 3 \text{ pm}$	$\beta: 101.38 \pm 0.03^\circ$	
1.0	MB	$a_o: 1001.0 \pm 3 \text{ pm}$	$c_o: 1683.8 \pm 2 \text{ pm}$	$c': 825.7 \text{ pm}$
		$b_o: 576.6 \pm 2 \text{ pm}$	$\beta: 101.27 \pm 0.02^\circ$	
1.1	MB	$a_o: 1001.0 \pm 3 \text{ pm}$	$c_o: 1684.3 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 825.8 \text{ pm}$
		$b_o: 565.6 \pm 2 \text{ pm}$	$\beta: 101.29 \pm 0.03^\circ$	
1.5	BE	$a_o: 1102.1 \pm 7 \text{ pm}$	$c_o: 2138.0 \pm 1.7 \text{ pm}$	$c': 1069 \text{ pm}$
1.5	MB	$a_o: 1000.9 \pm 4 \text{ pm}$	$c_o: 1684.0 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 825.6 \text{ pm}$
		$b_o: 576.5 \pm 2 \text{ pm}$	$\beta: 101.32 \pm 0.02^\circ$	
2.0	BE	$a_o: 1103.6 \pm 5 \text{ pm}$	$c_o: 2138.4 \pm 1.5 \text{ pm}$	$c': 1069. \text{ pm}$
2.0	MB			$c': 825.7 \text{ pm}$
		$a_o: 1103.7 \pm 4 \text{ pm}$	$c_o: 2139.6 \pm 8 \text{ pm}$	

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 18\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
bei 20°C und 100 % r.F.

TCAH : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

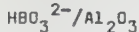
BE : $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Molverh.

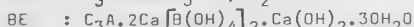
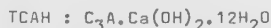


0	TCAH	$a_0: 575,5 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 9505 \pm 5 \text{ pm}$	$c': 792,1 \text{ pm}$
0.1	TCAH	$a_0: 575,6 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 9500 \pm 5 \text{ pm}$	$c': 791,7 \text{ pm}$
	MB			$c': 825,0 \text{ pm}$
0.2	TCAH	$a_0: 575,3 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 9504 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 792,0 \text{ pm}$
	MB	$a_0: 1001,1 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1683,6 \pm 5 \text{ pm}$	$c': 825,4 \text{ pm}$
		$b_0: 576,3 \pm 2 \text{ pm}$	$\theta: 101,33 \pm 0,07^\circ$	
0.3	TCAH	$a_0: 574,9 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 9501 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 791,8 \text{ pm}$
	MB	$a_0: 1000,2 \pm 6 \text{ pm}$	$c_0: 1683,1 \pm 7 \text{ pm}$	$c': 825,0 \text{ pm}$
		$b_0: 575,8 \pm 4 \text{ pm}$	$\theta: 101,37 \pm 0,05^\circ$	
0.4	TCAH	$a_0: 575,0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 9503 \pm 2 \text{ pm}$	$c': 791,9 \text{ pm}$
	MB	$a_0: 1000,8 \pm 4 \text{ pm}$	$c_0: 1683,2 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 825,2 \text{ pm}$
		$b_0: 576,6 \pm 3 \text{ pm}$	$\theta: 101,32 \pm 0,04^\circ$	
0.5	TCAH	$a_0: 574,8 \pm 5 \text{ pm}$	$c_0: 9506 \pm 5 \text{ pm}$	$c': 792,2 \text{ pm}$
	MB	$a_0: 1000,9 \pm 4 \text{ pm}$	$c_0: 1683,6 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 825,6 \text{ pm}$
		$b_0: 577,1 \pm 3 \text{ pm}$	$\theta: 101,25 \pm 0,03^\circ$	
0.6	TCAH	$a_0: 576,3 \pm 8 \text{ pm}$	$c_0: 9505 \pm 10 \text{ pm}$	$c': 792,1 \text{ pm}$
	MB	$a_0: 1000,1 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683,2 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 825,2 \text{ pm}$
		$b_0: 576,7 \pm 2 \text{ pm}$	$\theta: 101,33 \pm 0,03^\circ$	
0.7	TCAH			$c': 792,1 \text{ pm}$
	MB	$a_0: 1000,0 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1683,8 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 825,6 \text{ pm}$
		$b_0: 576,5 \pm 3 \text{ pm}$	$\theta: 101,30 \pm 0,02^\circ$	
0.8	TCAH			$c': 792,1 \text{ pm}$
	MB	$a_0: 1000,5 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1683,5 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 825,4 \text{ pm}$
		$b_0: 576,8 \pm 2 \text{ pm}$	$\theta: 101,32 \pm 0,02^\circ$	
0.9	MB	$a_0: 1000,6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683,9 \pm 2 \text{ pm}$	$c': 825,5 \text{ pm}$
		$b_0: 576,4 \pm 1 \text{ pm}$	$\theta: 101,36 \pm 0,01^\circ$	
1.0	MB	$a_0: 1000,6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683,7 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 825,5 \text{ pm}$
		$b_0: 576,6 \pm 1 \text{ pm}$	$\theta: 101,30 \pm 0,02^\circ$	
1.1	MB	$a_0: 1001,4 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1684,2 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 825,6 \text{ pm}$
		$b_0: 577,1 \pm 3 \text{ pm}$	$\theta: 101,37 \pm 0,02^\circ$	
	BE	$a_0: 1103,7 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2139,0 \pm 7 \text{ pm}$	$c': 1069 \text{ pm}$
1.5	MB	$a_0: 1001,4 \pm 7 \text{ pm}$	$c_0: 1683,0 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 825,2 \text{ pm}$
		$b_0: 576,7 \pm 2 \text{ pm}$	$\theta: 101,30 \pm 0,03^\circ$	
	BE	$a_0: 1103,3 \pm 7 \text{ pm}$	$c_0: 2138,6 \pm 12 \text{ pm}$	$c': 1069 \text{ pm}$
2.0	MB	$a_0: 1001,0 \pm 12 \text{ pm}$	$c_0: 1682,9 \pm 9 \text{ pm}$	$c': 824,4 \text{ pm}$
		$b_0: 576,8 \pm 2 \text{ pm}$	$\theta: 101,37 \pm 0,09^\circ$	
	BE	$a_0: 1102,3 \pm 4 \text{ pm}$	$c_0: 2139,1 \pm 13 \text{ pm}$	$c': 1070 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System



bei 20°C und 35 % r.F.



Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Molverh.

 $\text{HBO}_3^{2-}/\text{Al}_2\text{O}_3$

0.1	MB	$a_0: 999.3 \pm 8 \text{ pm}$ $b_0: 576.8 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.1 \pm 5 \text{ pm}$ $\beta: 101.39 \pm 0.05^\circ$	$c': 825.0 \text{ pm}$
0.2	MB	$a_0: 999.4 \pm 7 \text{ pm}$ $b_0: 576.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1684.0 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.42 \pm 0.04^\circ$	$c': 825.3 \text{ pm}$
0.3	MB	$a_0: 1000.0 \pm 5 \text{ pm}$ $b_0: 576.7 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1684.1 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.31 \pm 0.03^\circ$	$c': 825.7 \text{ pm}$
0.4	MB	$a_0: 1001.0 \pm 4 \text{ pm}$ $b_0: 576.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.8 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.35 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.4 \text{ pm}$
0.5	MB	$a_0: 1000.9 \pm 4 \text{ pm}$ $b_0: 576.1 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1684.0 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.36 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.5 \text{ pm}$
0.6	MB	$a_0: 1001.1 \pm 1 \text{ pm}$ $b_0: 576.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1683.6 \pm 4 \text{ pm}$ $\beta: 101.33 \pm 0.01^\circ$	$c': 825.4 \text{ pm}$
0.7	MB	$a_0: 1001.5 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 575.8 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1684.3 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.34 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.7 \text{ pm}$
0.8	MB	$a_0: 1001.4 \pm 4 \text{ pm}$ $b_0: 576.1 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.8 \pm 4 \text{ pm}$ $\beta: 101.36 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.4 \text{ pm}$
0.8	MB	$a_0: 1001.4 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.3 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.5 \pm 4 \text{ pm}$ $\beta: 101.37 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.2 \text{ pm}$
1.0	MB	$a_0: 1001.3 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.7 \pm 7 \text{ pm}$ $\beta: 101.34 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.4 \text{ pm}$
1.1	MB	$a_0: 1001.4 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.5 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1684.0 \pm 7 \text{ pm}$ $\beta: 101.32 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.6 \text{ pm}$
	BE	$a_0: 1102.4 \pm 5 \text{ pm}$	$c_0: 2136.9 \pm 1.0 \text{ pm}$	$c': 1069 \text{ pm}$
1.5	MB	$a_0: 1001.9 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.5 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1683.4 \pm 2 \text{ pm}$ $\beta: 101.31 \pm 0.04^\circ$	$c': 825.4 \text{ pm}$
	BE	$a_0: 1102.9 \pm 4 \text{ pm}$	$c_0: 2136.4 \pm 1.0 \text{ pm}$	$c': 1068. \text{ pm}$
2.0	MB	$a_0: 1001.9 \pm 1.8 \text{ pm}$ $b_0: 577.0 \pm 4 \text{ pm}$	$c_0: 1683.7 \pm 6 \text{ pm}$ $\beta: 101.47 \pm 0.07^\circ$	$c': 825.0 \text{ pm}$
	BE	$a_0: 1102.2 \pm 4 \text{ pm}$	$c_0: 2136.0 \pm 1.0 \text{ pm}$	$c': 1068 \text{ pm}$

Tab.

Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

 $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
bei 40°C und 100 % r.F.MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$ BE : $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca} [\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$ Stabilitätsgebiete von C_3AH_6 und CH nicht berücksichtigt

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Molverh.

$\text{HBO}_3^{2-}/\text{Al}_2\text{O}_3$

0.1	MB			c':825.1 pm
0.2	MB	$a_0:1000.0\pm6$ pm $b_0:576.5\pm2$ pm	$c_0:1683.2\pm5$ pm $\beta:101.41\pm0.05^\circ$	c':825.0 pm
0.3	MB	$a_0:1000.2\pm8$ pm $b_0:576.3\pm2$ pm	$c_0:1683.0\pm4$ pm $\beta:101.37\pm0.04^\circ$	c':825.0 pm
0.4	MB	$a_0:1000.2\pm2$ pm $b_0:576.9\pm2$ pm	$c_0:1682.9\pm2$ pm $\beta:101.31\pm0.01^\circ$	c':825.1 pm
0.5	MB	$a_0:999.8\pm2$ pm $b_0:576.8\pm1$ pm	$c_0:1683.2\pm2$ pm $\beta:101.37\pm0.01^\circ$	c':825.1 pm
0.6	MB	$a_0:999.9\pm5$ pm $b_0:577.1\pm4$ pm	$c_0:1683.1\pm4$ pm $\beta:101.30\pm0.03^\circ$	c':825.2 pm
0.7	MB	$a_0:1000.6\pm3$ pm $b_0:576.9\pm2$ pm	$c_0:1682.9\pm5$ pm $\beta:101.30\pm0.02^\circ$	c':825.0 pm
0.8	MB	$a_0:1001.0\pm4$ pm $b_0:576.9\pm5$ pm	$c_0:1683.3\pm2$ pm $\beta:101.44\pm0.02^\circ$	c':825.4 pm
0.9	MB	$a_0:1000.9\pm2$ pm $b_0:576.6\pm1$ pm	$c_0:1684.0\pm3$ pm $\beta:101.31\pm0.02^\circ$	c':825.6 pm
1.0	MB	$a_0:1000.5\pm2$ pm $b_0:576.5\pm1$ pm	$c_0:1684.0\pm3$ pm $\beta:101.30\pm0.01^\circ$	c':825.7 pm
1.1	MB	$a_0:1000.9\pm2$ pm $b_0:576.8\pm2$ pm	$c_0:1683.0\pm3$ pm $\beta:101.33\pm0.01^\circ$	c':825.1 pm
	BE	$a_0:1102.7\pm4$ pm	$c_0:2136.0\pm1.0$ pm	c':1068 pm
1.5	MB	$a_0:1000.5\pm3$ pm $b_0:576.8\pm3$ pm	$c_0:1683.1\pm6$ pm $\beta:101.27\pm0.04^\circ$	c':825.3 pm
	BE	$a_0:1103.5\pm3$ pm	$c_0:2136.5\pm1.0$ pm	c':1068 pm
2.0	MB	$a_0:1000.2\pm1.7$ pm $b_0:577.2\pm6$ pm	$c_0:1682.8\pm1.5$ pm $\beta:101.23\pm0.08^\circ$	c':825.3 pm
	BE	$a_0:1102.9\pm2$ pm	$c_0:2137.8\pm6$ pm	c':1069 pm

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

bei 40°C und 35 % r.F.

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

BE : $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$

Stabilitätsgebiete von C_3AH_6 und CH nicht berücksichtigt

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Molverh.

$\text{HBO}_3^{2-}/\text{Al}_2\text{O}_3$

0,5	MB	$a_0: 1001.4 \pm 6 \text{ pm}$ $b_0: 577.3 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.4 \pm 5 \text{ pm}$ $\theta: 101.27 \pm 03^\circ$	$c': 825.4 \text{ pm}$
0,6	MB	$a_0: 1001.5 \pm 5 \text{ pm}$ $b_0: 577.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1683.1 \pm 5 \text{ pm}$ $\theta: 101.27 \pm 03^\circ$	$c': 825.3 \text{ pm}$
0,7	MB	$a_0: 1001.3 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 577.4 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.0 \pm 5 \text{ pm}$ $\theta: 101.28 \pm 03^\circ$	$c': 825.2 \text{ pm}$
0,8	MB	$a_0: 1001.2 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 577.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.5 \pm 4 \text{ pm}$ $\theta: 101.29 \pm 02^\circ$	$c': 825.5 \text{ pm}$
0,9	MB	$a_0: 1001.6 \pm 5 \text{ pm}$ $b_0: 577.7 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.3 \pm 6 \text{ pm}$ $\theta: 101.34 \pm 05^\circ$	$c': 825.2 \text{ pm}$
1,0	MB	$a_0: 1001.7 \pm 4 \text{ pm}$ $b_0: 577.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1682.9 \pm 4 \text{ pm}$ $\theta: 101.27 \pm 02^\circ$	$c': 825.2 \text{ pm}$
1,1	MB	$a_0: 1002.2 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 578.3 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1681.7 \pm 3 \text{ pm}$ $\theta: 101.33 \pm 02^\circ$	$c': 824.5 \text{ pm}$
1,5	MB	$a_0: 1002.9 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 579.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1681.2 \pm 4 \text{ pm}$ $\theta: 101.29 \pm 03^\circ$	$c': 824.3 \text{ pm}$

Tab.

Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

bei 50°C und 35 % r.F.

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

Stabilitätsgebiete von C_3AH_6 und CH nicht berücksichtigt

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

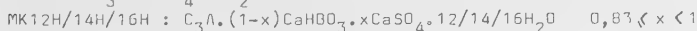
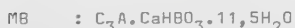
Mol % SO_4^{2-}

0	MB	$a_0: 1001.0 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.8 \pm 2 \text{ pm}$ $\theta: 101.27 \pm 02^\circ$	$c': 825.6 \text{ pm}$
10	MB	$a_0: 1000.8 \pm 4 \text{ pm}$ $b_0: 576.3 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1684.2 \pm 3 \text{ pm}$ $\theta: 101.28 \pm 02^\circ$	$c': 825.8 \text{ pm}$
	MK 12H			$c': 890 \text{ pm}$
20	MB	$a_0: 1000.6 \pm 5 \text{ pm}$ $b_0: 576.2 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1685.6 \pm 4 \text{ pm}$ $\theta: 101.23 \pm 03^\circ$	$c': 826.7 \text{ pm}$
	MK 12H			$c': 891 \text{ pm}$
	MK 14H			$c': 958 \text{ pm}$
30	MB	$a_0: 1002.0 \pm 1.2 \text{ pm}$ $b_0: 575.4 \pm 1.1 \text{ pm}$	$c_0: 1685.4 \pm 5 \text{ pm}$ $\theta: 101.35 \pm 09^\circ$	$c': 826.3 \text{ pm}$
	MK 12H	$a_0: 579.3 \pm 6 \text{ pm}$	$c_0: 2676.3 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 892.1 \text{ pm}$
	MK 14H			$c': 960 \text{ pm}$
40	MB			$c': 826.4 \text{ pm}$
	MK 12H	$a_0: 575.4 \pm 5 \text{ pm}$	$c_0: 2678.6 \pm 6 \text{ pm}$	$c': 892.9 \text{ pm}$
	MK 14H			$c': 958 \text{ pm}$
	MK 16H			$c': 104.0 \text{ pm}$
50	MB			$c': 826.7 \text{ pm}$
	MK 12H	$a_0: 576.3 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2679.4 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 893.1 \text{ pm}$
	MK 14H			$c': 960.2 \text{ pm}$
	MK 16H			$c': 104.1 \text{ pm}$
60	MB			$c': 827.4 \text{ pm}$
	MK 12H	$a_0: 576.2 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2678.7 \pm 5 \text{ pm}$	$c': 892.9 \text{ pm}$
	MK 14H			$c': 959.5 \text{ pm}$
	MK 16H			$c': 1040.2 \text{ pm}$
70	MB			$c': 826.7 \text{ pm}$
	MK 12H	$a_0: 575.8 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2679.4 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 893.1 \text{ pm}$
	MK 14H			$c': 959.2 \text{ pm}$
	MK 16H			$c': 1040.4 \text{ pm}$
80	MB			$c': 826 \text{ pm}$
	MK 12H	$a_0: 576.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2679.3 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 893.1 \text{ pm}$
	MK 14H			$c': 959.3 \text{ pm}$
	MK 16H			$c': 1039.5 \text{ pm}$
90	MK 12H	$a_0: 576.3 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2683.9 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 894.6 \text{ pm}$
	MK 14H			$c': 957 \text{ pm}$
100	MS 12H	$a_0: 576.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2686.3 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 895.4 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System



bei 20°C und 100 % S-F.



Zus.setzung

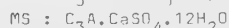
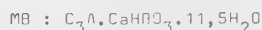
Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Mol% SO_4^{2-}

0	MB	$a_0: 1000.6 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 576.6 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1683.7 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.30 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.5 \text{ pm}$
10	MB	$a_0: 1000.5 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.7 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1684.1 \pm 7 \text{ pm}$ $\beta: 101.30 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.7 \text{ pm}$
	MK			$c': 890.0 \text{ pm}$
20	MB	$a_0: 1000.9 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.4 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1684.0 \pm 6 \text{ pm}$ $\beta: 101.31 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.6 \text{ pm}$
	MK			$c': 893.0 \text{ pm}$
30	MB	$a_0: 1000.7 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.5 \pm 9 \text{ pm}$	$c_0: 1684.5 \pm 4 \text{ pm}$ $\beta: 101.21 \pm 0.05^\circ$	$c': 826.2 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 577.1 \pm 5 \text{ pm}$	$c_0: 2677.2 \pm 1.1 \text{ pm}$	$c': 892.4 \text{ pm}$
40	MB	$a_0: 1000.4 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 577.0 \pm 9 \text{ pm}$	$c_0: 1684.8 \pm 1.0 \text{ pm}$ $\beta: 101.24 \pm 0.05^\circ$	$c': 826.2 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 576.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2676.7 \pm 7 \text{ pm}$	$c': 892.2 \text{ pm}$
50	MB	$a_0: 1000.9 \pm 4 \text{ pm}$ $b_0: 576.1 \pm 6 \text{ pm}$	$c_0: 1685.0 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.28 \pm 0.04^\circ$	$c': 826.2 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 576.1 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2688.3 \pm 6 \text{ pm}$	$c': 892.4 \text{ pm}$
60	MB			$c': 826.2 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 576.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2677.2 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 892.4 \text{ pm}$
70	MB			$c': 826.3 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 576.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2676.3 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 892.1 \text{ pm}$
80	MB			$c': 826.0 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 576.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2677.9 \pm 5 \text{ pm}$	$c': 892.6 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 576.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2683.2 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 894.4 \text{ pm}$
100	MS	$a_0: 576.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2685.2 \pm 5 \text{ pm}$	$c': 895.1 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

bei 20°C und 35 % r.F.

$$0,83 \leq x \leq 1$$

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

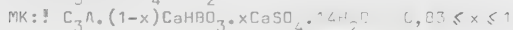
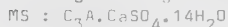
Mol% SO_4^{2-}

0	MB	$a_0: 1001.3 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.7 \pm 7 \text{ pm}$ $\beta: 101.34 \pm 02^\circ$	$c': 825.7 \text{ pm}$
10	MB	$a_0: 1000.7 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.1 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1683.2 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.31 \pm 03^\circ$	$c': 825.2 \text{ pm}$
	MK			$c': 960.0 \text{ pm}$
20	MB	$a_0: 1000.7 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 576.7 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1687.2 \pm 2 \text{ pm}$ $\beta: 101.33 \pm 02^\circ$	$c': 827.1 \text{ pm}$
	MK			$c': 960.0 \text{ pm}$
30	MB	$a_0: 1000.6 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 576.8 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1686.5 \pm 4 \text{ pm}$ $\beta: 101.30 \pm 05^\circ$	$c': 826.9 \text{ pm}$
	MK			$c': 961.0 \text{ pm}$
40	MB			$c': 827.5 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 575.9 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2879.3 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 959.8 \text{ pm}$
50	MB			$c': 827.0 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 576.1 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2879.9 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 960.0 \text{ pm}$
60	MB			$c': 826.8 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 576.1 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2877.1 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 959.0 \text{ pm}$
70	MB			$c': 826.6 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 575.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2877.7 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 959.2 \text{ pm}$
80	MB			$c': 827.0 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 575.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2875.0 \pm 7 \text{ pm}$	$c': 958.3 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 575.1 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2868.5 \pm 5 \text{ pm}$	$c': 956.2 \text{ pm}$
100	MS	$a_0: 575.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2867.8 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 955.9 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System



bei 40°C und 100 % r.F.



Zus.setzung

Bodenkörper

Mol% SO_4^{2-}

Phasen

Gitterkonstanten

0	MB	$a_0: 1000.5 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 576.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1684.0 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.30 \pm 01^\circ$	$c': 825.7 \text{ pm}$
10	MB	$a_0: 999.9 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.8 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1684.2 \pm 11 \text{ pm}$ $\beta: 101.30 \pm 03^\circ$	$c': 825.8 \text{ pm}$
	MK			$c': 894.0 \text{ pm}$
20	MB	$a_0: 1000.7 \pm 5 \text{ pm}$ $b_0: 576.4 \pm 4 \text{ pm}$	$c_0: 1687.6 \pm 6 \text{ pm}$ $\beta: 101.44 \pm 04^\circ$	$c': 827.0 \text{ pm}$
	MK			$c': 894.5 \text{ pm}$
30	MB	$a_0: 1001.1 \pm 4 \text{ pm}$ $b_0: 576.8 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1687.4 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.40 \pm 02^\circ$	$c': 827.1 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 576.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2681.4 \pm 5 \text{ pm}$	$c': 893.8 \text{ pm}$
40	MB			$c': 827.8 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 576.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2681.5 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 893.8 \text{ pm}$
50	MB			$c': 827.5 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 576.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2681.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c': 893.8 \text{ pm}$
60	MB			$c': 827.4 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 576.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2684.1 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 897.4 \text{ pm}$
70	MB			$c': 827.6 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 576.6 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2685.2 \pm 5 \text{ pm}$	$c': 895.1 \text{ pm}$
	MB			$c': 827.0 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 576.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2685.3 \pm 5 \text{ pm}$	$c': 895.1 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 576.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2684.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c': 894.8 \text{ pm}$
100	MS	$a_0: 576.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2684.4 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 894.8 \text{ pm}$

Tab.

Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaSO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$

bei 40°C und 35 % r.F.

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

MS : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaSO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot (1-x)\text{CaHBO}_3 \cdot x\text{CaSO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$

$0,83 \leq x \leq 1$

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

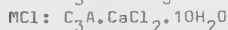
Mol% (2Cl^-)

0	MB	$a_0: 1001.0 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.8 \pm 2 \text{ pm}$ $\beta: 101.27 \pm .02^\circ$	$c': 825.6 \text{ pm}$
10	MB	$a_0: 1001.0 \pm 7 \text{ pm}$ $b_0: 577.1 \pm 8 \text{ pm}$	$c_0: 1683.4 \pm 1 \text{ pm}$ $\beta: 101.29 \pm .05^\circ$	$c': 825.4 \text{ pm}$
	MK			$c': 806.3 \text{ pm}$
20	MB			$c': 825.0 \text{ pm}$
	MB	$a_0: 578.1 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4832.0 \pm 10 \text{ pm}$	$c': 805.3 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 578.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4830.4 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 805.1 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 578.3 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 4804.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c': 800.7 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 577.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4787.5 \pm 10 \text{ pm}$	$c': 797.9 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 576.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 4764.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c': 794.1 \text{ pm}$
70	MK	$a_0: 575.8 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4742.2 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 790.4 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 575.2 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4733.7 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 788.9 \text{ pm}$
85	MK	$a_0: 575.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 4718.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c': 786.3 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 996.7 \pm 19 \text{ pm}$ $b_0: 574.7 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1629.2 \pm 5 \text{ pm}$ $\beta: 104.41 \pm .04^\circ$	$c': 789.0 \text{ pm}$
95	MK	$a_0: 997.3 \pm 8 \text{ pm}$ $b_0: 574.1 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1628.5 \pm 8 \text{ pm}$ $\beta: 104.41 \pm .04^\circ$	$c': 788.6 \text{ pm}$
100	MCl	$a_0: 997.0 \pm 7 \text{ pm}$ $b_0: 573.8 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1629.1 \pm 8 \text{ pm}$ $\beta: 104.44 \pm .04^\circ$	$c': 788.8 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System



bei 20°C und 100 % r.F.



Zus.setzung

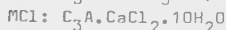
Bodenkörper

Gitterkonstanten

Mol% (2Cl^-)

0	MB	$a_0: 1000.5 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 576.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1684.0 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.29 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.7 \text{ pm}$
10	MB	$a_0: 1000.0 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.7 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1682.8 \pm 4 \text{ pm}$ $\beta: 101.29 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.1 \text{ pm}$
	MK			$c': 805.2 \text{ pm}$
20	MB			$c': 824.9 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 577.6 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4823.9 \pm 1.1 \text{ pm}$	$c': 804.0 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 577.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4816.8 \pm 1.0 \text{ pm}$	$c': 802.8 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 577.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4792.4 \pm 0.8 \text{ pm}$	$c': 798.7 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 576.7 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4777.6 \pm 0.9 \text{ pm}$	$c': 796.3 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 576.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4753.7 \pm 1.1 \text{ pm}$	$c': 792.3 \text{ pm}$
70	MK	$a_0: 575.6 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4736.4 \pm 0.9 \text{ pm}$	$c': 789.4 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 575.2 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4718.7 \pm 0.9 \text{ pm}$	$c': 786.6 \text{ pm}$
85	MK	$a_0: 574.8 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4710.2 \pm 1.0 \text{ pm}$	$c': 785.0 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 995.5 \pm 4 \text{ pm}$ $b_0: 573.8 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1629.4 \pm 4 \text{ pm}$ $\beta: 104.47 \pm 0.02^\circ$	$c': 788.9 \text{ pm}$
95	MK	$a_0: 996.7 \pm 6 \text{ pm}$ $b_0: 573.8 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1628.6 \pm 5 \text{ pm}$ $\beta: 104.43 \pm 0.02^\circ$	$c': 788.6 \text{ pm}$
100	MCl	$a_0: 997.2 \pm 7 \text{ pm}$ $b_0: 573.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1627.4 \pm 6 \text{ pm}$ $\beta: 104.35 \pm 0.03^\circ$	$c': 788.3 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

bei 20°C und 35 % r.F.

Zus.setzung

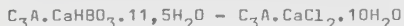
Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

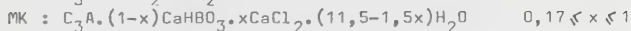
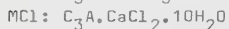
Mol% (2Cl⁻)

0	MB	$a_0: 1001.3 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.7 \pm 7 \text{ pm}$ $\theta: 101.34 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.4 \text{ pm}$
10	MB	$a_0: 1000.9 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.7 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1684.1 \pm 4 \text{ pm}$ $\theta: 101.27 \pm 0.04^\circ$	$c': 825.8 \text{ pm}$
	MK			$c': 807.5 \text{ pm}$
20	MB			$c': 825.9 \text{ pm}$
	MK	$a_0: 578.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4840.9 \pm 9 \text{ pm}$	$c': 806.8 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 578. / \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4832.5 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 805.4 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 577.6 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4798.6 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 799.8 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 576.7 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4783.0 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 797.2 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 576.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4763.4 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 793.9 \text{ pm}$
70	MK	$a_0: 576.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4744.9 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 790.8 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 575.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4722.0 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 787.0 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 574.8 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4710.5 \pm 6 \text{ pm}$	$c': 785.1 \text{ pm}$
100	MCl	$a_0: 996.9 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 574.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1630.1 \pm 3 \text{ pm}$ $\theta: 104.52 \pm 1.7^\circ$	$c': 789.0 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System



bei 40°C und 100% r.F.



Zus.setzung Bodenkörper Mol% (2Cl^-)	Phasen	Gitterkonstanten		
0	MB	$a_0: 1000.5 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 576.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1684.0 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.30 \pm 0.01^\circ$	$c': 825.7 \text{ pm}$
10	MB	$a_0: 1000.3 \pm 4 \text{ pm}$ $b_0: 576.6 \pm 5 \text{ pm}$	$c_0: 1683.5 \pm 4 \text{ pm}$ $\beta: 101.27 \pm 0.04^\circ$	$c': 825.5 \text{ pm}$
	MK			$c': 805.7 \text{ pm}$
20	MK	$a_0: 578.1 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4814.7 \pm 9 \text{ pm}$	$c': 802.5 \text{ pm}$
	MB			$c': 825.3 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 578.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4810.9 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 801.8 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 577.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4780.2 \pm 12 \text{ pm}$	$c': 796.7 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 576.7 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4768.1 \pm 9 \text{ pm}$	$c': 794.7 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 575.9 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4749.1 \pm 9 \text{ pm}$	$c': 791.5 \text{ pm}$
70	MK	$a_0: 575.8 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4729.9 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 788.3 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 575.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4709.1 \pm 9 \text{ pm}$	$c': 784.8 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 574.8 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4702.7 \pm 9 \text{ pm}$	$c': 783.8 \text{ pm}$
100	MCl	$a_0: 997.3 \pm 5 \text{ pm}$ $b_0: 573.3 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 1631.4 \pm 5 \text{ pm}$ $\beta: 104.68 \pm 0.05^\circ$	$c': 789.0 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
bei 40°C und 35 % r.F.

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

MCl : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot (1-x)\text{CaHBO}_3 \cdot x\text{CaCl}_2 \cdot (11,5-1,5x)\text{H}_2\text{O}$

$0,17 \leq x \leq 1$

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Mol% ($1/2\text{CO}_3^{2-}$)

0	MB	$a_0: 1001.0 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.8 \pm 2 \text{ pm}$ $\beta: 101.27 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.7 \text{ pm}$
10	MK	$a_0: 1001.3 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.7 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1683.6 \pm 2 \text{ pm}$ $\beta: 101.31 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.4 \text{ pm}$
20	MK	$a_0: 1001.1 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.9 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1683.3 \pm 2 \text{ pm}$ $\beta: 101.28 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.4 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 1000.8 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.9 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1681.1 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.32 \pm 0.03^\circ$	$c': 824.2 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 577.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 4944.7 \pm 1.0 \text{ pm}$	$c': 824.1 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 577.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4942.3 \pm 7 \text{ pm}$	$c': 823.7 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 577.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4941.2 \pm 6 \text{ pm}$	$c': 823.5 \text{ pm}$
70	MK	$a_0: 577.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4937.8 \pm 4 \text{ pm}$	$c': 823.0 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 577.2 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4936.2 \pm 3 \text{ pm}$	$c': 822.7 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 577.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4934.3 \pm 7 \text{ pm}$	$c': 822.4 \text{ pm}$
100	HC	$a_0: 576.9 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4932.2 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 822.0 \text{ pm}$

Tab.

Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{O}, 5\text{CaCO}_3 \cdot \text{O}, 5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
bei 20°C und 100 % r.F.

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

HC : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{O}, 5\text{CaCO}_3 \cdot \text{O}, 5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot (1-x)\text{CaHBO}_3 \cdot \text{O}, 5x\text{CaCO}_3 \cdot \text{O}, 5x\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

$0 \leq x \leq 1$

Zus. setzung		Gitterkonstanten		
Bodenkörper	Phasen			
Mol% ($1/2\text{CO}_3^{2-}$)				
0	MB	$a_0: 1000.6 \pm 2$ pm $b_0: 576.6 \pm 1$ pm	$c_0: 1683.7 \pm 3$ pm $\beta: 101.30 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.7$ pm
10	MK	$a_0: 1000.6 \pm 5$ pm $b_0: 576.9 \pm 3$ pm	$c_0: 1682.9 \pm 4$ pm $\beta: 101.26 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.3$ pm
20	MK	$a_0: 1000.4 \pm 3$ pm $b_0: 576.9 \pm 2$ pm	$c_0: 1681.9 \pm 6$ pm $\beta: 101.37 \pm 0.03^\circ$	$c': 824.5$ pm
30	MK	$a_0: 1000.2 \pm 3$ pm $b_0: 576.2 \pm 5$ pm	$c_0: 1681.6 \pm 5$ pm $\beta: 101.33 \pm 0.02^\circ$	$c': 824.4$ pm
40	MK	$a_0: 577.0 \pm 1$ pm	$c_0: 4942.0 \pm 1.4$ pm	$c': 823.7$ pm
50	MK	$a_0: 576.8 \pm 1$ pm	$c_0: 4938.7 \pm 1.3$ pm	$c': 823.1$ pm
60	MK	$a_0: 576.7 \pm 1$ pm	$c_0: 4935.1 \pm 0.7$ pm	$c': 822.5$ pm
70	MK	$a_0: 576.6 \pm 1$ pm	$c_0: 4931.5 \pm 0.8$ pm	$c': 821.9$ pm
80	MK	$a_0: 576.5 \pm 1$ pm	$c_0: 4928.7 \pm 0.8$ pm	$c': 821.4$ pm
90	MK	$a_0: 576.6 \pm 1$ pm	$c_0: 4925.0 \pm 0.8$ pm	$c': 820.8$ pm
100	HC	$a_0: 576.4 \pm 1$ pm	$c_0: 4922.8 \pm 0.9$ pm	$c': 820.5$ pm

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
bei 20°C und 35% r.F.

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

HC : $\text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot (1-x)\text{CaHBO}_3 \cdot 0,5x\text{CaCO}_3 \cdot 0,5x\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} \quad 0 \leq x \leq 1$

Zus. setzung		Gitterkonstanten		
Bodenkörper	Phasen			
Mol% ($1/2\text{CO}_3^{2-}$)				
0	MB	$a_0: 1001.3 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.7 \pm 7 \text{ pm}$ $\beta: 101.34 \pm 02^\circ$	$c': 825.4 \text{ pm}$
10	MK	$a_0: 1001.4 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 577.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1682.8 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.26 \pm 02^\circ$	$c': 825.0 \text{ pm}$
20	MK	$a_0: 1001.6 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1682.4 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.41 \pm 02^\circ$	$c': 824.6 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 1000.1 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1681.2 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.41 \pm 04^\circ$	$c': 824.0 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 577.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4943.0 \pm 6 \text{ pm}$	$c': 823.8 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 577.1 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4941.6 \pm 7 \text{ pm}$	$c': 823.6 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 577.2 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4938.0 \pm 6 \text{ pm}$	$c': 823.0 \text{ pm}$
70	MK	$a_0: 576.9 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4935.2 \pm 7 \text{ pm}$	$c': 822.5 \text{ pm}$
	MC			$c': 756.5 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 577.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4930.7 \pm 5 \text{ pm}$	$c': 821.8 \text{ pm}$
	MC			$c': 757 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 577.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4929.5 \pm 7 \text{ pm}$	$c': 821.6 \text{ pm}$
	MC			$c': 757 \text{ pm}$
100	HC	$a_0: 577.9 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4923.3 \pm 8 \text{ pm}$	$c': 820.6 \text{ pm}$
	MC			$c': 757 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System
 $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
 bei 40°C und 100% r.F.

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

MC : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$

HC : $\text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot (1-x)\text{CaHBO}_3 \cdot (0,5x-y)\text{CaCO}_3 \cdot (0,5x+y)\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$
 $0 \leq x \leq 1 \quad y > 0$

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Mol% ($1/2\text{CO}_3^{2-}$)

0	MB	$a_0: 1000.5 \pm 2$ pm $b_0: 576.5 \pm 1$ pm	$c_0: 1684.0 \pm 3$ pm $\beta: 101.30 \pm 01^\circ$	$c': 825.7$ pm
10	MK	$a_0: 1000.8 \pm 3$ pm $b_0: 577.0 \pm 1$ pm	$c_0: 1682.6 \pm 3$ pm $\beta: 101.30 \pm 02^\circ$	$c': 825.0$ pm
20	MK	$a_0: 1000.4 \pm 4$ pm $b_0: 577.0 \pm 1$ pm	$c_0: 1682.1 \pm 4$ pm $\beta: 101.31 \pm 03^\circ$	$c': 824.7$ pm
30	MK	$a_0: 1000.7 \pm 4$ pm $b_0: 577.1 \pm 1$ pm	$c_0: 1681.4 \pm 4$ pm $\beta: 101.32 \pm 02^\circ$	$c': 824.3$ pm
40	MK	$a_0: 576.9 \pm 1$ pm	$c_0: 4938.2 \pm 10$ pm	$c': 823.0$ pm
50	MK	$a_0: 577.2 \pm 1$ pm	$c_0: 4935.9 \pm 10$ pm	$c': 822.6$ pm
60	MK	$a_0: 577.0 \pm 1$ pm	$c_0: 4933.0 \pm 12$ pm	$c': 822.2$ pm
70	MK MC	$a_0: 577.2 \pm 1$ pm	$c_0: 4929.9 \pm 7$ pm	$c': 821.7$ pm $c': 757$ pm
80	MK MC	$a_0: 577.4 \pm 1$ pm	$c_0: 4925.2 \pm 6$ pm	$c': 821.0$ pm $c': 757$ pm
90	MK MC	$a_0: 577.4 \pm 1$ pm	$c_0: 4915.9 \pm 20$ pm	$c': 819.3$ pm $c': 757$ pm
100	HC MC	$a_0: 577.7 \pm 1$ pm	$c_0: 4910.7 \pm 23$ pm	$c': 818.5$ pm $c': 757$ pm

Tab.

Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
bei 40°C und 35% r.F.

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

MC : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$

HC : $\text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot (1-x)\text{CaHBO}_3 \cdot (0,5x-y)\text{CaCO}_3 \cdot (0,5x+y)\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$
 $0 \leq x \leq 1$ $y > 0$

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Mol% ($1/2\text{CO}_3^{2-}$)

0	MB	$a_0: 1001.3 \pm 2$ pm $b_0: 577.3 \pm 1$ pm	$c_0: 1683.3 \pm 2$ pm $\theta: 101.28 \pm 02^\circ$	$c': 825.4$ pm
10	MK	$a_0: 1001.8 \pm 4$ pm $b_0: 577.8 \pm 2$ pm	$c_0: 1682.0 \pm 5$ pm $\theta: 101.24 \pm 02^\circ$	$c': 824.9$ pm
20	MK	$a_0: 1001.7 \pm 2$ pm $b_0: 577.9 \pm 1$ pm	$c_0: 1680.4 \pm 3$ pm $\theta: 101.32 \pm 02^\circ$	$c': 823.9$ pm
30	MK	$a_0: 1001.7 \pm 3$ pm $b_0: 577.7 \pm 2$ pm	$c_0: 1680.6 \pm 5$ pm $\theta: 101.29 \pm 03^\circ$	$c': 824.0$ pm
40	MK	$a_0: 578.1 \pm 1$ pm	$c_0: 4940.7 \pm 12$ pm	$c': 823.5$ pm
50	MK	$a_0: 578.2 \pm 1$ pm	$c_0: 4936.0 \pm 8$ pm	$c': 822.7$ pm
60	MK	$a_0: 578.1 \pm 1$ pm	$c_0: 4932.4 \pm 6$ pm	$c': 822.1$ pm
70	MK	$a_0: 577.8 \pm 1$ pm	$c_0: 4925.8 \pm 7$ pm	$c': 821.0$ pm
	MC			$c': 756.8$ pm
80	MK	$a_0: 578.2 \pm 2$ pm	$c_0: 4919.9 \pm 18$ pm	$c': 820$ pm
	MC			$c': 756.6$ pm
90	MK			$c': 820$ pm
	MC	$a_0: 578.2 \pm 2$ pm $b_0: 574.6 \pm 2$ pm $c_0: 785.6 \pm 1$ pm	$\alpha: 92.54 \pm 04^\circ$ $\beta: 102.03 \pm 03^\circ$ $\gamma: 120.12 \pm 03^\circ$	$c': 756.5$ pm
100	MC	$a_0: 578.0 \pm 2$ pm $b_0: 574.2 \pm 2$ pm $c_0: 785.5 \pm 1$ pm	$\alpha: 92.64 \pm 03^\circ$ $\beta: 102.00 \pm 02^\circ$ $\gamma: 120.02 \pm 02^\circ$	$c': 756.5$ pm

Tab.

Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
bei 60°C und 100% r.F.

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

MC : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot (1-x)\text{CaHBO}_3 \cdot (0,5x-y)\text{CaCO}_3 \cdot (0,5x+y)\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$
 $0 \leq x < 1$ $y > 0$

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Mol% ($1/2\text{CO}_3^{2-}$)

0	MB	$a_0: 1001.7 \pm 5 \text{ pm}$ $b_0: 577.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.8 \pm 6 \text{ pm}$ $\beta: 101.29 \pm 04^\circ$	$c': 825.6 \text{ pm}$
10	MK	$a_0: 1001.3 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 577.3 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1682.6 \pm 4 \text{ pm}$ $\beta: 101.20 \pm 03^\circ$	$c': 825.3 \text{ pm}$
20	MK	$a_0: 1001.8 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 577.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1680.7 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.39 \pm 02^\circ$	$c': 823.8 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 1000.7 \pm 4 \text{ pm}$ $b_0: 577.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1680.1 \pm 6 \text{ pm}$ $\beta: 101.34 \pm 03^\circ$	$c': 823.6 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 578.1 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4935.1 \pm 1.7 \text{ pm}$	$c': 822.5 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 577.9 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4925.2 \pm 1.0 \text{ pm}$	$c': 820.9 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 577.8 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4919.7 \pm 1.3 \text{ pm}$	$c': 820.0 \text{ pm}$
70	MK MC	$a_0: 577.6 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4913.9 \pm 1.4 \text{ pm}$	$c': 819.0 \text{ pm}$ $c': 756.5 \text{ pm}$
80	MK MC	$a_0: 577.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4909.1 \pm 1.3 \text{ pm}$	$c': 818.2 \text{ pm}$ $c': 756.6 \text{ pm}$
90	MK MC	$a_0: 577.8 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 573.5 \pm 3 \text{ pm}$ $c_0: 785.4 \pm 2 \text{ pm}$	$\alpha: 92.60 \pm 03^\circ$ $\beta: 101.98 \pm 02^\circ$ $\gamma: 120.16 \pm 04^\circ$	$c': 817.3 \text{ pm}$ $c': 756.4 \text{ pm}$
100	MC	$a_0: 577.9 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 573.9 \pm 2 \text{ pm}$ $c_0: 785.3 \pm 1 \text{ pm}$	$\alpha: 92.60 \pm 02^\circ$ $\beta: 102.02 \pm 02^\circ$ $\gamma: 120.08 \pm 04^\circ$	$c': 756.5 \text{ pm}$

Tab.

Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 0,5\text{CaCO}_3 \cdot 0,5\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
bei 60°C und 35% r.F.

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

MC : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot (1-x)\text{CaHBO}_3 \cdot (0,5x-y)\text{CaCO}_3 \cdot (0,5x+y)\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$
 $0 \leq x \leq 1$ $y > 0$

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Mol% CO_3^{2-}

0	MB	$a_0: 1001.0 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.8 \pm 2 \text{ pm}$ $\beta: 101.27 \pm .02^\circ$	$c^*: 825.6 \text{ pm}$
10	MK	$a_0: 1000.8 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.2 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1683.4 \pm 2 \text{ pm}$ $\beta: 101.40 \pm .02^\circ$	$c^*: 825.1 \text{ pm}$
20	MK	$a_0: 1001.13 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 576.9 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.3 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.32 \pm .02^\circ$	$c^*: 825.2 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 1000.9 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 577.2 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1682.9 \pm 2 \text{ pm}$ $\beta: 101.31 \pm .01^\circ$	$c^*: 825.1 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 577.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4946.3 \pm 6 \text{ pm}$	$c^*: 824.4 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 577.1 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4941.8 \pm 7 \text{ pm}$	$c^*: 823.6 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 577.1 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4934.2 \pm 5 \text{ pm}$	$c^*: 822.4 \text{ pm}$
70	MK MC	$a_0: 577.6 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 4927.3 \pm 8 \text{ pm}$	$c^*: 821.2 \text{ pm}$ $b^*: 756.8 \text{ pm}$
80	MK MC	$a_0: 577.4 \pm 1 \text{ pm}$ $a_0: 579.4 \pm 4 \text{ pm}$ $b_0: 574.0 \pm 3 \text{ pm}$ $c_0: 785.7 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 4924.5 \pm 9 \text{ pm}$ $\alpha: 92.65 \pm .05^\circ$ $\beta: 101.90 \pm .05^\circ$ $\gamma: 120.16 \pm .04^\circ$	$c^*: 820.8 \text{ pm}$ $c^*: 756.9 \text{ pm}$
90	MK MC	$a_0: 578.6 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 573.7 \pm 3 \text{ pm}$ $c_0: 786.1 \pm 3 \text{ pm}$	$\alpha: 92.81 \pm .04^\circ$ $\beta: 101.91 \pm .06^\circ$ $\gamma: 120.13 \pm .03^\circ$	$c^*: 820.7 \text{ pm}$ $c^*: 756.9 \text{ pm}$
100	MC	$a_0: 578.5 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 573.4 \pm 2 \text{ pm}$ $c_0: 785.7 \pm 3 \text{ pm}$	$\alpha: 92.61 \pm .04^\circ$ $\beta: 102.02 \pm .07^\circ$ $\gamma: 120.01 \pm .03^\circ$	$c^*: 756.8 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$

bei 20°C und 100 % r.F.

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

MC : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot (1-x) \text{CaHBO}_3 \cdot x \text{CaCO}_3 \cdot (11,5+2x)\text{H}_2\text{O}$

$0 \leq x \leq 0,67$

Zus.setzung

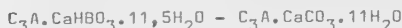
Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

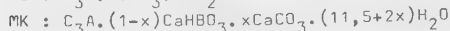
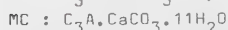
Mol% CO_3^{2-}

0	MB	$a_0: 1000.6 \pm 2$ pm $b_0: 576.6 \pm 1$ pm	$c_0: 1683.7 \pm 3$ pm $\beta: 101.29 \pm 0.02^\circ$	$c^1: 825.6$ pm
10	MK	$a_0: 1000.8 \pm 3$ pm $b_0: 577.0 \pm 2$ pm	$c_0: 1683.2 \pm 5$ pm $\beta: 101.29 \pm 0.02^\circ$	$c^1: 825.3$ pm
20	MK	$a_0: 1000.5 \pm 4$ pm $b_0: 576.7 \pm 2$ pm	$c_0: 1682.4 \pm 4$ pm $\beta: 101.44 \pm 0.02^\circ$	$c^1: 824.5$ pm
30	MK	$a_0: 1000.4 \pm 2$ pm $b_0: 576.5 \pm 1$ pm	$c_0: 1681.6 \pm 3$ pm $\beta: 101.37 \pm 0.02^\circ$	$c^1: 824.3$ pm
40	MK	$a_0: 577.0 \pm 1$ pm	$c_0: 4939.3 \pm 8$ pm	$c^1: 823.2$ pm
50	MK	$a_0: 577.0 \pm 1$ pm	$c_0: 4937.4 \pm 7$ pm	$c^1: 822.9$ pm
60	MK	$a_0: 577.2 \pm 1$ pm	$c_0: 4925.7 \pm 7$ pm	$c^1: 821.0$ pm
70	MK	$a_0: 577.0 \pm 1$ pm	$c_0: 4920.1 \pm 1.0$ pm	$c^1: 820.0$ pm
	MC			$c^1: 757$ pm
80	MK			$c^1: 819$ pm
	MC	$a_0: 577.8 \pm 3$ pm $b_0: 574.4 \pm 3$ pm $c_0: 785.7 \pm 4$ pm	$\alpha: 92.61 \pm 0.04^\circ$ $\beta: 102.02 \pm 0.05^\circ$ $\gamma: 120.15 \pm 0.07^\circ$	$c^1: 745.7$ pm
90	MK			$c^1: 819$ pm
	MC	$a_0: 578.3 \pm 2$ pm $b_0: 574.5 \pm 4$ pm $c_0: 785.4 \pm 2$ pm	$\alpha: 92.61 \pm 0.03^\circ$ $\beta: 102.01 \pm 0.04^\circ$ $\gamma: 120.12 \pm 0.03^\circ$	$c^1: 756.8$ pm
100	MC	$a_0: 578.3 \pm 1$ pm $b_0: 573.8 \pm 2$ pm $c_0: 785.5 \pm 1$ pm	$\alpha: 92.64 \pm 0.02^\circ$ $\beta: 101.96 \pm 0.03^\circ$ $\gamma: 120.10 \pm 0.02^\circ$	$c^1: 756.8$ pm

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System



bei 20°C und 35 % r.F.



$$0 \leq x \leq 0,67$$

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Mol% CO_3^{2-}

0	MB	$a_0: 1001.3 \pm 3$ pm $b_0: 576.5 \pm 2$ pm	$c_0: 1683.7 \pm 7$ pm $\beta: 101.34 \pm 02^\circ$	$c': 825.6$ pm
10	MK	$a_0: 1001.9 \pm 3$ pm $b_0: 576.6 \pm 2$ pm	$c_0: 1682.5 \pm 3$ pm $\beta: 101.41 \pm 02^\circ$	$c': 824.6$ pm
20	MK	$a_0: 1002.0 \pm 4$ pm $b_0: 578.0 \pm 2$ pm	$c_0: 1681.4 \pm 4$ pm $\beta: 101.33 \pm 03^\circ$	$c': 824.3$ pm
	MC			$c': 756.8$ pm
30	MK	$a_0: 1002.0 \pm 3$ pm $b_0: 577.8 \pm 1$ pm	$c_0: 1680.3 \pm 2$ pm $\beta: 101.37 \pm 02^\circ$	$c': 823.9$ pm
	MC			$c': 756.5$ pm
40	MK	$a_0: 578.3 \pm 2$ pm	$c_0: 4941.6 \pm 1.1$ pm	$c': 823.6$ pm
	MC			$c': 756.8$ pm
50	MK	$a_0: 578.0 \pm 2$ pm	$c_0: 4939.9 \pm 1.1$ pm	$c': 823.3$ pm
	MC			$c': 756.6$ pm
60	MK	$a_0: 578.0 \pm 2$ pm	$c_0: 4930.7 \pm 1.3$ pm	$c': 821.8$ pm
	MC			$c': 756.5$ pm
70	MK	$a_0: 578.1 \pm 2$ pm	$c_0: 4926.4 \pm 1.7$ pm	$c': 821.1$ pm
	MC	$a_0: 578.0 \pm 4$ pm $b_0: 573.7 \pm 3$ pm $c_0: 785.9 \pm 3$ pm	$\alpha: 92.70 \pm 05^\circ$ $\beta: 101.95 \pm 04^\circ$ $\gamma: 120.00 \pm 06^\circ$	$c': 757.0$ pm
80	MK			$c': 819$ pm
	MC	$a_0: 578.6 \pm 3$ pm $b_0: 574.1 \pm 4$ pm $c_0: 786.0 \pm 3$ pm	$\alpha: 92.65 \pm 04^\circ$ $\beta: 101.97 \pm 03^\circ$ $\gamma: 120.06 \pm 02^\circ$	$c': 757.0$ pm
90	MC	$a_0: 578.7 \pm 3$ pm	$\alpha: 92.64 \pm 02^\circ$	$c': 756.9$ pm
	MK	$b_0: 574.2 \pm 2$ pm $c_0: 785.8 \pm 2$ pm	$\beta: 101.98 \pm 03^\circ$ $\gamma: 120.07 \pm 03^\circ$	
100	MC	$a_0: 578.1 \pm 3$ pm $b_0: 574.1 \pm 2$ pm $c_0: 785.5 \pm 2$ pm	$\alpha: 92.64 \pm 02^\circ$ $\beta: 101.96 \pm 02^\circ$ $\gamma: 120.12 \pm 03^\circ$	$c': 756.7$ pm

Tab.

Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O} - \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$ bei 40°C und 100% r.F.

bei 40°C und 100 % r.F.

MB : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

MC : $\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCO}_3 \cdot 11\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot (1-x)\text{CaHBO}_3 \cdot (x-y)\text{CaCO}_3 \cdot y\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$

$0 \leq x \leq 0,67$

$y > 0$

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Mol% CO_3^{2-}

0	MB	$a_0: 1000.5 \pm 2$ pm $b_0: 576.5 \pm 1$ pm	$c_0: 1684.0 \pm 3$ pm $\beta: 101.30 \pm 01^\circ$	$c': 825.7$ pm
10	MK	$a_0: 1000.8 \pm 4$ pm $b_0: 577.0 \pm 2$ pm	$c_0: 1682.2 \pm 4$ pm $\beta: 101.30 \pm 02^\circ$	$c': 824.8$ pm
20	MK MC	$a_0: 1001.1 \pm 4$ pm	$c_0: 1681.8 \pm 6$ pm	$c': 824.5$ pm $c': 756.8$ pm
30	MK MC	$a_0: 1002.0 \pm 6$ pm $b_0: 577.1 \pm 3$ pm	$c_0: 1680.1 \pm 9$ pm $\beta: 101.35 \pm 05^\circ$	$c': 823.6$ pm $c': 756.5$ pm
40	MK MC	$a_0: 577.8 \pm 1$ pm	$c_0: 4941.0 \pm 1.2$ pm	$c': 823.5$ pm $c': 756.7$ pm
50	MK MC	$a_0: 578.1 \pm 1$ pm $a_0: 577.5 \pm 3$ pm $b_0: 574.0 \pm 3$ pm $c_0: 785.4 \pm 2$ pm	$c_0: 4933.7 \pm 7$ pm $\alpha: 92.66 \pm 04^\circ$ $\beta: 101.94 \pm 06^\circ$ $\gamma: 120.03 \pm 03^\circ$	$c': 822.3$ pm $c': 756.7$ pm
60	MK MC	$a_0: 577.8 \pm 1$ pm $a_0: 577.5 \pm 2$ pm $b_0: 574.2 \pm 2$ pm $c_0: 785.2 \pm 2$ pm	$c_0: 4927.5 \pm 22$ pm $\alpha: 92.61 \pm 03^\circ$ $\beta: 101.99 \pm 04^\circ$ $\gamma: 120.06 \pm 05^\circ$	$c': 821.3$ pm $c': 756.5$ pm
70	MK MC	$a_0: 577.5 \pm 2$ pm $a_0: 577.7 \pm 3$ pm $b_0: 573.5 \pm 4$ pm $c_0: 785.5 \pm 3$ pm	$c_0: 4920.3 \pm 27$ pm $\alpha: 92.71 \pm 04^\circ$ $\beta: 102.03 \pm 03^\circ$ $\gamma: 120.08 \pm 03^\circ$	$c': 820.0$ pm $c': 756.7$ pm
80	MK MC	$a_0: 577.6 \pm 2$ pm $b_0: 573.8 \pm 3$ pm $c_0: 785.2 \pm 3$ pm	$\alpha: 92.62 \pm 03^\circ$ $\beta: 101.98 \pm 03^\circ$ $\gamma: 120.07 \pm 02^\circ$	$c': 818.5$ pm
90	MK MC	$a_0: 577.9 \pm 2$ pm $b_0: 573.6 \pm 2$ pm $c_0: 785.6 \pm 2$ pm	$\alpha: 92.62 \pm 02^\circ$ $\beta: 101.95 \pm 03^\circ$ $\gamma: 120.05 \pm 03^\circ$	$c': 820$ pm $c': 756.6$ pm
100	MC	$a_0: 578.0 \pm 2$ pm $b_0: 573.7 \pm 1$ pm $c_0: 785.9 \pm 2$ pm	$\alpha: 92.77 \pm 03^\circ$ $\beta: 102.02 \pm 02^\circ$ $\gamma: 120.05 \pm 02^\circ$	

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System



bei 40°C und 35 % r.F.



$$0 \leq x \leq 1$$

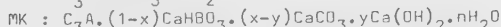
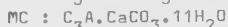
$$y > 0$$

0	MB	$a_0: 1001.3 \pm 2$ pm $b_0: 577.3 \pm 1$ pm	$c_0: 1683.3 \pm 2$ pm $\beta: 101.28 \pm 02^\circ$	$c': 825.4$ pm
10	MK	$a_0: 1001.5 \pm 4$ pm $b_0: 577.8 \pm 2$ pm	$c_0: 1682.8 \pm 2$ pm $\beta: 101.28 \pm 02^\circ$	$c': 825.1$ pm
20	MK	$a_0: 1000.9 \pm 2$ pm $b_0: 577.6 \pm 1$ pm	$c_0: 1682.4 \pm 2$ pm $\beta: 101.26 \pm 01^\circ$	$c': 825.0$ pm
	MC			$c': 757$ pm
30	MK	$a_0: 1001.6 \pm 2$ pm $b_0: 577.7 \pm 1$ pm	$c_0: 1680.8 \pm 3$ pm $\beta: 101.32 \pm 02^\circ$	$c': 824.1$ pm
	MC			$c': 757$ pm
40	MK	$a_0: 578.0 \pm 2$ pm	$c_0: 4931.2 \pm 9$ pm	$c': 821.9$ pm
	MC			$c': 756.5$ pm
50	MK	$a_0: 577.9 \pm 2$ pm	$c_0: 4927.3 \pm 8$ pm	$c': 821.2$ pm
	MC			$c': 756.8$ pm
60	MK	$a_0: 577.9 \pm 2$ pm	$c_0: 4923.7 \pm 1.1$ pm	$c': 820.6$ pm
	MC			$c': 756.7$ pm
70	MK	$a_0: 577.7 \pm 2$ pm	$c_0: 4921.5 \pm 1.0$ pm	$c': 820.2$ pm
	MC			$c': 756.7$ pm
80	MK			$c': 819.7$ pm
	MC	$a_0: 578.5 \pm 2$ pm $b_0: 574.1 \pm 2$ pm $c_0: 785.4 \pm 2$ pm	$\alpha: 92.61 \pm 03^\circ$ $\beta: 102.00 \pm 02^\circ$ $\gamma: 120.13 \pm 04^\circ$	$c': 756.7$ pm
90	MK			$c': 820$ pm
	MC	$a_0: 578.5 \pm 2$ pm $b_0: 574.1 \pm 2$ pm $c_0: 785.7 \pm 2$ pm	$\alpha: 92.62 \pm 02^\circ$ $\beta: 102.07 \pm 02^\circ$ $\gamma: 120.09 \pm 03^\circ$	$c': 756.9$ pm
100	MC	$a_0: 578.0 \pm 2$ pm $b_0: 574.2 \pm 1$ pm $c_0: 785.5 \pm 2$ pm	$\alpha: 92.64 \pm 01^\circ$ $\beta: 102.00 \pm 02^\circ$ $\gamma: 120.02 \pm 03^\circ$	$c': 756.5$ pm

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System



bei 60°C und 100 % r.F.



$$0 \leq x \leq 0,67$$

$$y > 0$$

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

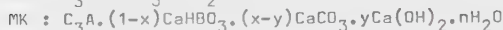
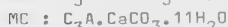
Mol% CO_3^{2-}

0	MB	$a_0: 1001.7 \pm 5 \text{ pm}$ $b_0: 577.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1683.8 \pm 6 \text{ pm}$ $\beta: 101.29 \pm 0.04^\circ$	$c': 825.8 \text{ pm}$
10	MK	$a_0: 1001.4 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 577.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1682.9 \pm 3 \text{ pm}$ $\beta: 101.31 \pm 0.02^\circ$	$c': 825.1 \text{ pm}$
20	MK	$a_0: 1001.6 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 577.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 1681.9 \pm 4 \text{ pm}$ $\beta: 101.31 \pm 0.02^\circ$	$c': 824.6 \text{ pm}$
	MC			$c': 757 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 1001.5 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 577.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 1680.2 \pm 8 \text{ pm}$ $\beta: 101.35 \pm 0.05^\circ$	$c': 823.6 \text{ pm}$
	MC			$c': 757 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 578.1 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 4932.3 \pm 1.9 \text{ pm}$	$c': 822.1 \text{ pm}$
	MC			$c': 756.5 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 578.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 4920.6 \pm 1.0 \text{ pm}$	$c': 820.1 \text{ pm}$
	MC			$c': 756.5 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 578.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 4910.8 \pm 2.3 \text{ pm}$	$c': 818.5 \text{ pm}$
	MC			$c': 756.8 \text{ pm}$
70	MK			$c': 818.0 \text{ pm}$
	MC	$a_0: 578.6 \pm 3 \text{ pm}$ $b_0: 574.3 \pm 3 \text{ pm}$ $c_0: 785.6 \pm 3 \text{ pm}$	$\alpha: 92.55 \pm 0.03^\circ$ $\beta: 101.92 \pm 0.04^\circ$ $\gamma: 120.10 \pm 0.03^\circ$	$c': 756.9 \text{ pm}$
80	MK			$c': 817.6 \text{ pm}$
	MC	$a_0: 578.2 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 573.6 \pm 4 \text{ pm}$ $c_0: 785.3 \pm 2 \text{ pm}$	$\alpha: 92.65 \pm 0.02^\circ$ $\beta: 102.01 \pm 0.03^\circ$ $\gamma: 120.02 \pm 0.03^\circ$	$c': 756.8 \text{ pm}$
90	MK			$c': 820 \text{ pm}$
	MC	$a_0: 577.9 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 573.9 \pm 2 \text{ pm}$ $c_0: 784.9 \pm 3 \text{ pm}$	$\alpha: 92.64 \pm 0.01^\circ$ $\beta: 101.96 \pm 0.03^\circ$ $\gamma: 120.07 \pm 0.02^\circ$	$c': 756.6 \text{ pm}$
100	MC	$a_0: 577.9 \pm 2 \text{ pm}$ $b_0: 573.9 \pm 2 \text{ pm}$ $c_0: 785.3 \pm 2 \text{ pm}$	$\alpha: 92.60 \pm 0.01^\circ$ $\beta: 102.02 \pm 0.02^\circ$ $\gamma: 120.08 \pm 0.02^\circ$	$c': 756.5 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System



bei 60°C und 35 % r.F.



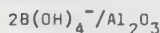
$$0 \leq x \leq 0,67 \quad y > 0$$

Zus.setzung

Einwaage Phasen

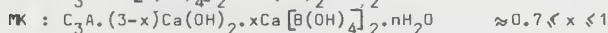
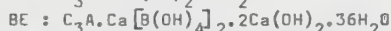
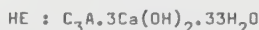
Gitterkonstanten

Molverh.



0	HE	$a_0: 1090.0 \pm .1$ pm	$c_0: 2127.4 \pm .4$ pm
0.05	MK	$a_0: 1099.6 \pm .1$ pm	$c_0: 2124.0 \pm .3$ pm
0.1	MK	$a_0: 1100.5 \pm .1$ pm	$c_0: 2123.7 \pm .6$ pm
0.2	MK	$a_0: 1100.9 \pm .1$ pm	$c_0: 2124.0 \pm .5$ pm
0.3	MK	$a_0: 1100.7 \pm .1$ pm	$c_0: 2123.2 \pm .7$ pm
0.4	MK	$a_0: 1100.9 \pm .1$ pm	$c_0: 2123.0 \pm .6$ pm
0.5	MK	$a_0: 1101.0 \pm .2$ pm	$c_0: 2122.7 \pm .7$ pm
0.6	MK	$a_0: 1101.1 \pm .2$ pm	$c_0: 2124.0 \pm .9$ pm
0.7	MK	$a_0: 1101.6 \pm .1$ pm	$c_0: 2123.2 \pm .4$ pm
0.8	MK	$a_0: 1101.1 \pm .1$ pm	$c_0: 2122.7 \pm .4$ pm
0.9	MK	$a_0: 1101.8 \pm .2$ pm	$c_0: 2123.0 \pm .5$ pm
1.0	BE	$a_0: 1101.3 \pm .1$ pm	$c_0: 2123.2 \pm .7$ pm
1.2	BE	$a_0: 1100.9 \pm .1$ pm	$c_0: 2124.0 \pm .7$ pm
1.4	BE	$a_0: 1101.3 \pm .1$ pm	$c_0: 2123.2 \pm .6$ pm
1.6	BE	$a_0: 1101.2 \pm .1$ pm	$c_0: 2123.5 \pm .6$ pm
1.8	BE	$a_0: 1101.0 \pm .2$ pm	$c_0: 2123.1 \pm .8$ pm
2.0	BE	$a_0: 1101.5 \pm .1$ pm	$c_0: 2122.2 \pm .6$ pm

Tab. Gitterkonstanten der Ettringite im System



Zus.setzung

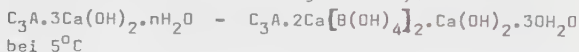
Einwaage

Mol% ($4B(OH)_4^-$)

Gitterkonstanten

0	a_0 : -	c_0 : -
10	a_0 : -	c_0 : -
20	a_0 : -	c_0 : -
30	a_0 : $1102.2 \pm .6$ pm	c_0 : 2136.5 ± 1.2 pm
40	a_0 : $1103.0 \pm .4$ pm	c_0 : 2137.4 ± 1.2 pm
50	a_0 : $1102.4 \pm .2$ pm	c_0 : $2137.0 \pm .8$ pm
60	a_0 : $1102.4 \pm .2$ pm	c_0 : $2138.2 \pm .7$ pm
70	a_0 : $1102.9 \pm .2$ pm	c_0 : $2138.3 \pm .7$ pm
80	a_0 : $1102.4 \pm .3$ pm	c_0 : $2138.2 \pm .9$ pm
90	a_0 : $1102.3 \pm .2$ pm	c_0 : $2137.6 \pm .7$ pm
100	a_0 : $1102.2 \pm .2$ pm	c_0 : $2138.8 \pm .6$ pm

Tab. Gitterkonstanten der Ettringite im System



Zus.setzung

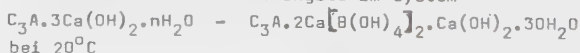
Einwaage

Mol% ($4 B(OH)_4^-$)

Gitterkonstanten

0	a_0 : -	c_0 : -
10	a_0 : -	c_0 : -
20	a_0 : -	c_0 : -
30	a_0 : -	c_0 : -
40	a_0 : $1102.5 \pm .4$ pm	c_0 : $2136.6 \pm .6$ pm
50	a_0 : $1102.5 \pm .5$ pm	c_0 : 2137.2 ± 1.0 pm
60	a_0 : $1101.9 \pm .5$ pm	c_0 : 2138.9 ± 1.3 pm
70	a_0 : $1102.1 \pm .3$ pm	c_0 : 2138.1 ± 1.0 pm
80	a_0 : $1101.9 \pm .2$ pm	c_0 : 2137.7 ± 1.1 pm
90	a_0 : $1102.4 \pm .2$ pm	c_0 : $2138.3 \pm .8$ pm
100	a_0 : $1102.9 \pm .2$ pm	c_0 : $2139.0 \pm .6$ pm

Tab. Gitterkonstanten der Ettringite im System



Zus.setzung

Einwaage

Phasen

Gitterkonstanten

Molverh.

$3\text{Cl}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$

0	HE	$a_0: 1090.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2127.4 \pm 4 \text{ pm}$
0.1		$a_0: 1087.9 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2127.7 \pm 1.1 \text{ pm}$
0.2		$a_0: 1087.9 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2126.7 \pm 5 \text{ pm}$
0.3		$a_0: 1087.7 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2125.3 \pm 1.2 \text{ pm}$
0.4		$a_0: 1087.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2126.1 \pm 1.2 \text{ pm}$
0.5		$a_0: 1086.7 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2126.0 \pm 1.4 \text{ pm}$
0.6		$a_0: 1088.3 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2125.2 \pm 1.0 \text{ pm}$
0.7		$a_0: 1087.3 \pm 4 \text{ pm}$	$c_0: 2126.5 \pm 1.5 \text{ pm}$
0.8		$a_0: 1088.9 \pm 4 \text{ pm}$	$c_0: 2124.2 \pm 1.1 \text{ pm}$
0.9		$a_0: 1088.7 \pm 6 \text{ pm}$	$c_0: 2124.2 \pm 2.0 \text{ pm}$
1.0		$a_0: 1089.8 \pm 5 \text{ pm}$	$c_0: 2124.5 \pm 1.8 \text{ pm}$
2.0		$a_0: 1088.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2125.4 \pm 9 \text{ pm}$
3.0		$a_0: 1087.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2125.8 \pm 6 \text{ pm}$
6.0		$a_0: 1088.1 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2126.8 \pm 8 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Ettringite im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 33\text{H}_2\text{O} - \text{"C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O"}$

HE : $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 33\text{H}_2\text{O}$

Zus.setzung

Einwaage

Phasen

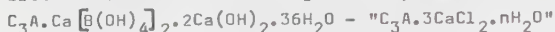
Gitterkonstanten

Mol% 6Cl^-

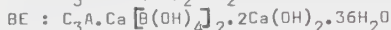
0	BE	$a_0: 1101.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2123.2 \pm 3 \text{ pm}$
10	BE	$a_0: 1101.7 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2124.0 \pm 3 \text{ pm}$
20	BE	$a_0: 1101.9 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2124.2 \pm 5 \text{ pm}$
30	BE	$a_0: 1101.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2124.2 \pm 4 \text{ pm}$
40	BE	$a_0: 1101.9 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2124.3 \pm 3 \text{ pm}$
50	BE	$a_0: 1100.9 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2123.4 \pm 5 \text{ pm}$
60	BE	$a_0: 1100.6 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2123.8 \pm 5 \text{ pm}$
70	BE	$a_0: 1100.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2124.0 \pm 3 \text{ pm}$
80	BE	$a_0: 1100.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2124.8 \pm 7 \text{ pm}$
90	BE	$a_0: 1100.2 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2125.1 \pm 4 \text{ pm}$
95	BE	$a_0: 1100.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2126.4 \pm 8 \text{ pm}$
100	HE	$a_0: 1090.1 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2125.8 \pm 7 \text{ pm}$

Tab.

Gitterkonstanten der Ettringite im System



HE : $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ chloridhaltig



Zus.setzung

Einwaage

Phasen

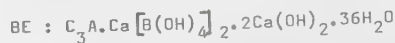
Gitterkonstanten

Mol% (6Cl^-)

0	BE	$a_0: 1102.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2138.8 \pm 6 \text{ pm}$
10	BE	$a_0: 1102.6 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2140.1 \pm 6 \text{ pm}$
20	BE	$a_0: 1102.7 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2140.1 \pm 10 \text{ pm}$
30	BE	$a_0: 1102.7 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2140.0 \pm 6 \text{ pm}$
40	BE	$a_0: 1102.4 \pm 9 \text{ pm}$	$c_0: 2139.0 \pm 7 \text{ pm}$

Tab.

Gitterkonstanten der Ettringite im System



Zus.setzung

Einwaage

Phasen

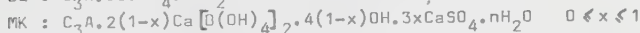
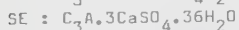
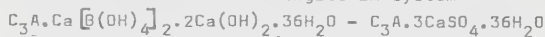
Gitterkonstanten

Mol% (3SO_4^{2-})

0	BE	$a_0: 1101.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2123.2 \pm 7 \text{ pm}$
2.5	MK	$a_0: 1107.2 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2129.1 \pm 7 \text{ pm}$
5	MK	$a_0: 1109.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2130.2 \pm 8 \text{ pm}$
7.5	MK	$a_0: 1111.9 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2133.5 \pm 3 \text{ pm}$
10	MK	$a_0: 1113.7 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2138.7 \pm 6 \text{ pm}$
20	MK	$a_0: 1116.9 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2143.0 \pm 9 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 1119.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2143.1 \pm 8 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 1119.8 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2145.5 \pm 9 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 1119.4 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2146.0 \pm 9 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 1120.1 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2146.3 \pm 5 \text{ pm}$
70	MK	$a_0: 1120.6 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2145.5 \pm 9 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 1121.4 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2146.5 \pm 9 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 1122.2 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2146.4 \pm 7 \text{ pm}$
100	SE	$a_0: 1122.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2150.4 \pm 4 \text{ pm}$

Tab.

Gitterkonstanten der Ettringite im System



Zus.setzung

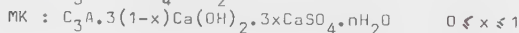
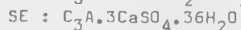
Einwaage Phasen

Gitterkonstanten

Mol% (3SO_4^{2-})

0	HE	$a_0: 1090.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2127.4 \pm 4 \text{ pm}$
2.5	MK	$a_0: 1114.9 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2130.4 \pm 9 \text{ pm}$
5	MK	$a_0: 1117.8 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2136.7 \pm 9 \text{ pm}$
10	MK	$a_0: 1119.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2138.7 \pm 8 \text{ pm}$
20	MK	$a_0: 1120.4 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2139.3 \pm 7 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 1119.7 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2141.5 \pm 9 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 1120.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2141.4 \pm 7 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 1120.3 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2142.1 \pm 7 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 1120.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2141.7 \pm 9 \text{ pm}$
70	MK	$a_0: 1120.7 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2142.2 \pm 6 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 1121.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2144.1 \pm 9 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 1121.1 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2145.6 \pm 7 \text{ pm}$
100	SE	$a_0: 1122.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2150.4 \pm 4 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Ettringite im System



Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Mol% 3SO_4^{2-}

0	BE	$a_0: 1102.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2138.5 \pm 4 \text{ pm}$
5	MK1	$a_0: 1102.9 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2141.0 \pm 7 \text{ pm}$
10	MK1	$a_0: 1104.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2141.0 \pm 5 \text{ pm}$
20	MK1	$a_0: 1105.0 \pm 5 \text{ pm}$	$c_0: 2140.8 \pm 16 \text{ pm}$
	MK2	$a_0: 1101.1 \pm 4 \text{ pm}$	$c_0: 2148.4 \pm 16 \text{ pm}$
30	MK1	$a_0: 1105.8 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2140.4 \pm 5 \text{ pm}$
	MK2	$a_0: 1110.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2149.3 \pm 4 \text{ pm}$
40	MK2	$a_0: 1111.6 \pm 4 \text{ pm}$	$c_0: 2152.9 \pm 13 \text{ pm}$
50	MK2	$a_0: 1115.9 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2153.6 \pm 7 \text{ pm}$
60	MK2	$a_0: 1116.7 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2154.3 \pm 5 \text{ pm}$
70	MK2	$a_0: 1119.6 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2154.6 \pm 12 \text{ pm}$
80	MK2	$a_0: 1119.0 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2153.9 \pm 9 \text{ pm}$
90	MK2	$a_0: 1120.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2154.0 \pm 8 \text{ pm}$
100	SE	$a_0: 1122.9 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2152.8 \pm 3 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Ettringite im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca} [\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$
bei 4°C

BE : $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca} [\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$

SE : $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$

MK1: $\text{C}_3\text{A} \cdot 2(1-x)\text{Ca} [\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot (1-x)\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 3x\text{CaSO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ $0 \leq x \leq 0,17$

MK2: $\text{C}_3\text{A} \cdot 2(1-x)\text{Ca} [\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot (1-x)\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 3x\text{CaSO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ $0,33 \leq x \leq 1$

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

Gitterkonstanten

Mol% (3SO_4^{2-})

0	BE	$a_0: 1102.9 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2139.0 \pm 6 \text{ pm}$
5	MK	$a_0: 1103.1 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2141.3 \pm 4 \text{ pm}$
10	MK	$a_0: 1104.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2143.4 \pm 6 \text{ pm}$
20	MK	$a_0: 1108.4 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2147.0 \pm 5 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 1110.8 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2148.6 \pm 4 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 1112.7 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2151.2 \pm 4 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 1115.7 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2151.2 \pm 3 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 1118.7 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2151.1 \pm 6 \text{ pm}$
70	MK	$a_0: 1120.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2151.2 \pm 2 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 1121.8 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2150.2 \pm 5 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 1122.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2150.4 \pm 5 \text{ pm}$
100	SE	$a_0: 1122.3 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2149.9 \pm 7 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Ettringite im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$
bei 20°C

BE : $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$

SE : $\text{C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot 2(1-x)\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot (1-x)\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 3x\text{CaSO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$
 $0 \leq x \leq 1$

Zus.setzung

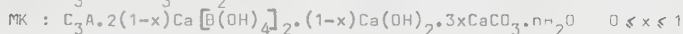
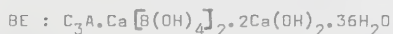
Einwaage Phasen

Gitterkonstanten

Mol% (3CO_3^{2-})

0	BE	$a_0: 1101.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2123.2 \pm 7 \text{ pm}$
10	MK	$a_0: 1101.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2124.0 \pm 8 \text{ pm}$
20	MK	$a_0: 1101.0 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2122.1 \pm 5 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 1101.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2122.3 \pm 9 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 1100.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2121.4 \pm 8 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 1100.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2121.3 \pm 9 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 1099.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2120.6 \pm 9 \text{ pm}$
70	MK	$a_0: 1098.4 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2120.6 \pm 7 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 1096.8 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2121.0 \pm 9 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 1096.3 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2120.0 \pm 3 \text{ pm}$
	CE	$a_0: 1086.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2122.6 \pm 7 \text{ pm}$
100	CE	$a_0: 1085.5 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2123.0 \pm 9 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Ettringite im System



Zus.setzung

Einwaage Phasen

Gitterkonstanten

Mol% (3CO_3^{2-})

0	BE	$a_0: 1102.2 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2138.8 \pm 6 \text{ pm}$
10	MK	$a_0: 1101.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2139.9 \pm 9 \text{ pm}$
20	MK	$a_0: 1101.9 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2138.8 \pm 11 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 1102.9 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2137.5 \pm 5 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 1103.0 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2133.1 \pm 9 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 1103.0 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2127.5 \pm 11 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 1102.5 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2125.6 \pm 11 \text{ pm}$
70	MK	$a_0: 1102.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2126.8 \pm 9 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 1103.0 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2127.4 \pm 11 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 1102.7 \pm 5 \text{ pm}$	$c_0: 2124.8 \pm 15 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Ettringite im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O} - \text{"C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}"$
bei 5°C

BE : $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot 2(2-x)\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot (1-x)\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 3x\text{CaCO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O} \quad 0 \leq x < 1$

Zus.setzung

Einwaage Phasen

Gitterkonstanten

Mol% (3CO_3^{2-})

0	BE	$a_0: 1102.9 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2139.0 \pm 6 \text{ pm}$
10	MK	$a_0: 1101.9 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2138.7 \pm 4 \text{ pm}$
20	MK	$a_0: 1102.6 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2139.2 \pm 5 \text{ pm}$
30	MK	$a_0: 1102.7 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2136.1 \pm 1 \text{ pm}$
40	MK	$a_0: 1102.6 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2132.9 \pm 4 \text{ pm}$
50	MK	$a_0: 1102.6 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2131.0 \pm 4 \text{ pm}$
60	MK	$a_0: 1102.7 \pm 2 \text{ pm}$	$c_0: 2127.0 \pm 7 \text{ pm}$
70	MK	$a_0: 1102.5 \pm 1 \text{ pm}$	$c_0: 2126.5 \pm 5 \text{ pm}$
80	MK	$a_0: 1102.0 \pm 3 \text{ pm}$	$c_0: 2127.4 \pm 8 \text{ pm}$
90	MK	$a_0: 1101.8 \pm 5 \text{ pm}$	$c_0: 2126.6 \pm 13 \text{ pm}$

Tab. Gitterkonstanten der Ettringite im System

$\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O} - \text{"C}_3\text{A} \cdot 3\text{CaCO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}"$
bei 20°C

BE : $\text{C}_3\text{A} \cdot 2\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$

MK : $\text{C}_3\text{A} \cdot 2(1-x)\text{Ca}[\text{B}(\text{OH})_4]_2 \cdot (1-x)\text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 3x\text{CaCO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O} \quad 0 \leq x < 1$

Zus.setzung			Gitterkonstanten
Bodenkörper	Phasen		
Mol% (HBO_3^{2-})			
0	-		-
10	FeMB		c' :813.0 pm
20	FeMB		c' :812.2 pm
30	FeMB		c' :812.7 pm
40	FeMB	a_o : 589.3+-3 pm	c_o :4877.0+-12pm c' :812.8 pm
50	FeMB	a_o : 589.3+-3 pm	c_o :4875.5+-12pm c' :812.6 pm
60	FeMB	a_o : 589.8+-2 pm	c_o :4875.7+-5 pm c' :812.6 pm
70	FeMB	a_o : 589.9+-1 pm	c_o :4876.2+-5 pm c' :812.7 pm
80	FeMB	a_o : 590.1+-2 pm	c_o :4876.3+-11pm c' :812.7 pm
90	FeMB	a_o : 590.3+-2 pm	c_o :4877.5+-9 pm c' :812.9 pm
100	FeMB	a_o : 590.4+-1 pm	c_o :4876.9+-8 pm c' :812.8 pm

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$\text{C}_3\text{F} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
bei 20°C und 100 % r.F.

FeMB : $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

Zus.setzung			Gitterkonstanten
Bodenkörper	Phasen		
Mol% (HBO_3^{2-})			
0	-		-
10	FeMB		c' :813.4 pm
20	FeMB		c' :813.4 pm
30	FeMB	a_o : 589.8+-1 pm	c_o :4874.8+-15pm c' :812.5 pm
40	FeMB	a_o : 589.5+-1 pm	c_o :4874.5+-9 pm c' :812.4 pm
50	FeMB	a_o : 589.7+-2 pm	c_o :4874.6+-15pm c' :812.4 pm
60	FeMB	a_o : 589.6+-1 pm	c_o :4874.1+-6 pm c' :812.3 pm
70	FeMB	a_o : 590.2+-1 pm	c_o :4873.7+-9 pm c' :812.3 pm
80	FeMB	a_o : 589.7+-1 pm	c_o :4872.9+-7 pm c' :812.2 pm
90	FeMB	a_o : 590.0+-2 pm	c_o :4872.9+-9 pm c' :812.2 pm
100	FeMB	a_o : 590.4+-1 pm	c_o :4873.1+-6 pm c' :812.2 pm

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$\text{C}_3\text{F} \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$
bei 20°C und 35 % r.F.

FeMB : $\text{C}_3\text{F} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5\text{H}_2\text{O}$

Zus.setzung Bodenkörper Mol% (2Cl ⁻)	Phasen	Gitterkonstanten		
0	FeMB	a ₀ : 590.4+-1 pm	c ₀ : 4873.1+-6 pm	c' : 812.2 pm
10	FeMB	a ₀ : 590.2+-1 pm	c ₀ : 4872.0+-1.3pm	c' : 812.0 pm
	FeMK	a ₀ : 590.2+-3 pm	c ₀ : 4779.9+-1.4pm	c' : 796.7 pm
20	FeMK	a ₀ : 590.4+-1 pm	c ₀ : 4771.2+-1.0pm	c' : 795.2 pm
30	FeMK	a ₀ : 589.9+-1 pm	c ₀ : 4752.5+-9 pm	c' : 792.1 pm
40	FeMK	a ₀ : 589.4+-1 pm	c ₀ : 4746.1+-1.0pm	c' : 791.0 pm
50	FeMK	a ₀ : 588.6+-1 pm	c ₀ : 4725.4+-1.0pm	c' : 787.6 pm
60	FeMK	a ₀ : 588.6+-1 pm	c ₀ : 4717.2+-1.1pm	c' : 786.2 pm
70	FeMK	a ₀ : 587.6+-1 pm	c ₀ : 4701.3+-7 pm	c' : 783.6 pm
80	FeMK	a ₀ : 587.2+-1 pm	c ₀ : 4692.4+-1.2pm	c' : 782.1 pm
90	FeMK	a ₀ : 586.6+-1 pm	c ₀ : 2339.6+-5 pm	c' : 779.9 pm
100	FeMCl	a ₀ : 585.8+-2 pm	c ₀ : 2328.5+-1.2pm	c' : 776.2 pm

Tab. Gitterkonstanten der Bodenkörper im System

$C_3F.CaHBO_3.11,5H_2O - C_3F.CaCl_2.10H_2O$
bei 20°C und 35 % r.F.

FeMB : $C_3F.CaHBO_3.11,5H_2O$

FeMCl : $C_3F.CaCl_2.10H_2O$

FeMK : $C_3F.(1-x)CaHBO_3.xCaCl_2.(11,5-1,5x)H_2O$ 0,17 < x < 1

Zus.setzung

Bodenkörper Phasen

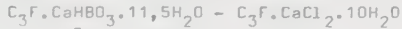
Gitterkonstanten

Mol% (2Cl⁻)

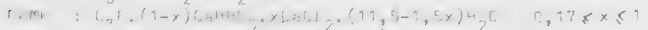
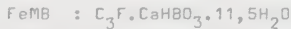
0	FeMB	a ₀ : 590.4+-1 pm	c ₀ :4876.9+-8 pm	c':812.8 pm
10	FeMB	a ₀ : 589.9+-1 pm	c ₀ :4873.8+-9 pm	c':812.3 pm
	FeMB	a ₀ : 590.2+-2 pm	c ₀ :4784.8+-9 pm	c':795.5 pm
20	FeMK	a ₀ : 590.6+-1 pm	c ₀ :4779.5+-7 pm	c':796.6 pm
30	FeMK	a ₀ : 590.0+-1 pm	c ₀ :4759.8+-16pm	c':793.3 pm
40	FeMK	a ₀ : 589.5+-1 pm	c ₀ :4755.9+-9 pm	c':792.6 pm
50	FeMK	a ₀ : 589.0+-1 pm	c ₀ :4733.2+-8 pm	c':788.9 pm
60	FeMK	a ₀ : 589.0+-2 pm	c ₀ :4726.0+-11pm	c':787.7 pm
70	FeMK	a ₀ : 588.5+-3 pm	c ₀ :4717.0+-19pm	c':786.2 pm
80	FeMK	a ₀ : 587.5+-2 pm	c ₀ :4701.0+-16 pm	c':783.5 pm
90	FeMK	a ₀ : 586.8+-2 pm	c ₀ :2344.7+-9 pm	c':781.6 pm
100	FeMCl	a ₀ :1006.2+-19pm	c ₀ :1578.6+-13pm	c':782.4 pm
		b ₀ : 587.3+-6 pm	b: 97.56+-10 ⁰	

Tab.

Gitterkonstanten der Bodenkörper im System



bei 20°C und 100 % r.F.



$C_3A \cdot Ca(OH)_2 \cdot 12 H_2O$

nach FISCHER (1977)

$a_0: 572.5 \pm 3 \text{ pm}$

$c_0: 9527 \pm 5 \text{ pm}$

$2\theta (Cu K_{\alpha 1})$	$d \text{ (pm)}$	h	k	i	l
11.14	793.6	0	0	0	12
19.76	448.9	1	0	$\bar{1}$	9
22.38	396.9	0	0	0	24
24.58	361.9	1	0	$\bar{1}$	18
31.22	286.2	1	1	$\bar{2}$	0
31.35	285.1	1	1	$\bar{2}$	3
32.13'	278.3	1	1	$\bar{2}$	8
33.48	267.4	1	0	$\bar{1}$	30 / 1 2 13
33.84	264.7	0	0	0	36
34.33	261.0	1	1	$\bar{2}$	15
36.20	247.9	2	0	$\bar{2}$	0
36.66	244.9	2	0	$\bar{2}$	6
37.99	236.6	2	0	$\bar{2}$	12
41.01	219.9	2	0	$\bar{2}$	20
42.98	210.3	2	0	$\bar{2}$	24
44.07	205.3	2	0	$\bar{2}$	26
45.67	198.5	0	0	0	48
46.43	195.4	2	0	$\bar{2}$	30
49.02	185.7	2	0	$\bar{2}$	34
50.40	180.9	2	0	$\bar{2}$	36

$C_3A \cdot CaHBO_3 \cdot 11,5 H_2O$

$a_0: 1000.5 \pm 2 \text{ pm}$

$c_0: 1684.0 \pm 3 \text{ pm}$

RG: C c , C 2/c

$b_0: 576.5 \pm 1 \text{ pm}$

$\beta: 101.30 \pm 1^\circ$

2 λ (Cu $K_{\alpha 1}$)

d (pm)

h k l

10.71	825.3	0	0	2			
19.13	463.5	2	0	2			
21.52	412.6	0	0	4			
22.82	389.4	2	0	2			
22.88	388.3	1	1	3			
25.29	351.9	2	0	4			
30.90	289.1	2	0	4			
30.95	288.7	3	1	1	/	1	5
31.01	288.1	0	2	0			
31.50	283.8	0	2	1			
32.80	272.8	3	1	1			
32.88	272.2	0	2	2			
34.05	263.1	2	0	6	/	1	5
35.05	255.8	3	1	2			
35.11	255.4	0	2	3			
36.60	245.3	4	0	0			
36.68	244.8	2	2	2			
38.00	236.6	3	1	3			
38.07	236.2	0	2	4	/	3	1 5
38.83	231.7	4	0	4	/	2	2 2
40.33	223.4	4	0	2			
40.56	222.2	2	0	6			
40.64	221.8	1	1	7			
41.49	217.5	3	1	4			
41.54	217.2	0	2	5	/	3	1 6
43.82	206.4	0	0	8			

2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	l			
44.05	205.4	1	1	7			
44.36	204.0	2	2	4	/	4	0 6
45.46	199.3	3	1	5			
45.51	199.1	0	2	6	/	3	1 7
46.56	194.9	4	0	4			
46.73	194.2	2	2	6			
51.22	178.2	2	0	8			
51.29	178.0	1	1	9			
51.92	176.0	2	2	6			
51.97	175.8	4	0	8			
54.99	166.8	1	1	9	/	5	1 3
		6	0	2	/	2	0 10
55.14	166.4	3	3	1	/	1	3 5
55.62	165.1	0	0	10			
64.60	144.1	0	4	0			
65.45	142.5	6	0	8			
65.72	142.0	0	4	2			

$\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaHBO}_3 \cdot 11,5 \text{H}_2\text{O}$

($\geq 60^\circ\text{C}$)

$a_0: 577,6 \pm 1 \text{ pm}$

$c_0: 4951,1 \pm 7 \text{ pm}$

RG: R 3c , R $\bar{3}c$

$2\theta (\text{Cu K}_{\alpha 1})$	$d (\text{pm})$	h	k	i	l
10.71	825.1	0	0	0	6
19.12	463.8	1	0	$\bar{1}$	4
21.52	412.5	0	0	0	12
22.82	389.3	0	1	$\bar{1}$	8
25.28	351.9	1	0	$\bar{1}$	10
30.94	288.8'	1	1	$\bar{2}$	0
31.41	284.5	1	1	$\bar{2}$	3
32.83	272.6	1	1	$\bar{2}$	6
34.04	263.1	1	0	$\bar{1}$	16
35.08	255.5	1	1	$\bar{2}$	9
36.61	245.2	0	2	$\bar{2}$	4
38.02	236.5	1	1	$\bar{2}$	12
38.80	231.9	2	0	$\bar{2}$	8
40.36	223.3	0	2	$\bar{2}$	10
40.61	222.0	0	1	$\bar{1}$	20
41.54	217.2	1	1	$\bar{2}$	15
43.84	206.3	0	0	0	24
44.08	205.2	1	0	$\bar{1}$	22
44.34	204.1	0	2	$\bar{2}$	14
45.50	199.2	1	1	$\bar{2}$	18
51.28	178.0	0	1	1	26
51.95	175.9	2	0	$\bar{2}$	20
55.01	166.7	3	0	$\bar{3}$	0



a₀: 576.4 ±.1 pm

c₀: 2685.2 ±.5 pm

RG: 0

2θ (Cu K _{α1})	d (pm)	h	k	i	l
9.87	895	0	0	0	3
19.82	447.6	0	0	0	6
22.16	400.8	1	0	1	4
24.32	365.7	0	1	1	5
29.92	298.4	0	0	0	9
30.99	288.3	1	1	2	0
32.11	278.5	0	1	1	8
32.60	274.4	1	1	2	3
36.11	248.5	0	2	2	1
36.57	245.5	2	0	2	2
37.05	242.4	1	1	2	6
38.01	236.5	1	0	1	10
38.45	233.8	0	2	2	4
39.80	226.3	2	0	2	5
40.27	223.8	0	0	0	12
41.15	219.2	0	1	1	11
43.63	207.3	1	1	2	
45.25	200.2	2	0	2	
47.60	190.9	1	0	1	13
49.85	182.8	0	2	2	10
50.98	179.0	0	1	1	14
51.67	176.8	1	1	2	12
52.38	174.5	2	0	2	11
55.17	166.3	3	0	3	0
57.90	159.1	0	2	2	13
59.19	156.0	3	0	3	6
59.86	154.4	2	1	3	10



a_0 : 575.5 +- .1 pm

c_0 : 2867.8 +- .3 pm

RG: R 3, R 3

2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	i	l
9.25	955.2	0	0	0	3
18.55	477.9	0	0	0	6
21.70	409.2	1	0	$\bar{1}$	4
23.61	376.5	0	1	$\bar{1}$	5
27.98	318.6	0	0	0	9
31.07	287.6	1	1	$\bar{2}$	0
32.47	275.5	1	1	$\bar{2}$	3
36.12	248.5	1	0	$\bar{1}$	10
36.42	246.5	1	1	$\bar{2}$	6
37.62	238.9	0	0	0	12
38.22	235.3	0	2	$\bar{2}$	4
38.93	231.1	0	1	$\bar{1}$	11
42.30	213.5	1	1	$\bar{2}$	9
44.89	201.7	1	0	$\bar{1}$	13
47.52	191.2	0	0	0	15
47.98	189.4	0	1	$\bar{1}$	14
49.54	183.8	1	1	2	12
50.62	180.2	2	0	$\bar{2}$	11
55.23	166.2	3	0	$\bar{3}$	0

$\text{C}_3\text{A} \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$

(α - Monochloride)

$a_0: 997.2 \pm 7 \text{ pm}$

$c_0: 1627.4 \pm 6 \text{ pm}$

RG: 00, 0 170

$b_0: 573.6 \pm 2 \text{ pm}$

$\theta: 104.35 \pm 03^\circ$

$2\theta (\text{Cu K}\alpha_1)$	$d (\text{pm})$	h	k	l
11.21	786.6	0	0	2
17.97	493.2	1	1	0
18.14	486.6	$\bar{1}$	1	1
19.95	444.7	$\bar{1}$	1	2
22.54	394.1	0	0	4
23.10	284.7	$\bar{1}$	1	3
23.85	272.6	2	0	2
25.36	350.9	$\bar{2}$	0	4
26.28	338.8	1	1	3
27.09	328.9	$\bar{1}$	1	4
31.16	286.8	0	2	0
31.68	282.2	0	2	1
32.69	273.7	2	0	4 / 3
33.20	269.6	0	2	2
33.58	266.6	3	1	1
34.09	262.6	0	0	6
34.55	259.4	$\bar{2}$	0	6
34.97	256.4	$\bar{3}$	1	4
35.64	251.7	0	2	3
36.19	248.0	3	1	2
36.75	244.3	$\bar{2}$	2	2
37.19	241.6	4	0	0
37.92	237.4	$\bar{3}$	1	5
38.56	233.7	$\bar{4}$	0	4
38.80	231.5	0	2	4
39.49	226.0	3	1	3
39.61	227.1	2	2	2

2θ (Cu K $_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	l
40.59	222.1	$\bar{2}$	2	4
41.90	215.4	$\bar{1}$	1	7
42.57	212.2	0	2	5
43.03	210.0	2	0	6
45.14	200.7	$\bar{2}$	0	8
45.8	198	2	2	4 / $\bar{3}$ 1 7
46.01	197.1	0	0	8
46.30	195.9	1	1	7
46.85	193.7	0	2	6
52.07	175.5	1	1	8 / $\bar{4}$ 0 3
54.08	169.4	2	2	6
55.40	165.7	$\bar{3}$	3	1
58.49	157.7	0	0	10

$C_3A \cdot CaCl_2 \cdot 10 H_2O$

(β - Monochlorid)

(nach PÖLLMANN 1984)

a_0 : 573.8 pm

c_0 : 4688.4 pm

RG: R 7 v 2 5:

2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	i	l
11.32	781	0	0	0	6
18.24	486	1	0	7	2
22.78	390	0	0	0	12
23.45	379	1	0	7	2
26.11	341	1	0	7	10
31.13	287	1	1	2	0
32.22	278	1	0	7	14
33.22	269	1	1	2	6
34.42	260	0	0	0	18
35.57	252	1	0	7	16
35.70	251	1	1	2	9
36.32	247	2	0	2	2
36.94	243	2	0	2	4
38.90	231	1	1	2	12
39.35	229	2	0	2	8
41.09	219.5	2	0	2	1
42.65	212	1	0	7	20
42.76	211	1	1	2	15
45.40	199.6	2	0	2	14
45.37	199.5	1	0	7	22
45.49	199.2	0	0	0	24
47.07	192.9	1	1	2	18
47.94	189.6	2	0	2	16
48.54	187.4	2	1	3	2
49.04	185.6	2	1	3	4
49.41	184.3	2	1	3	5
50.97	179	2	1	3	8

2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	i	l
51.84	176.2	2	1	$\bar{3}$	21
52.42	174.4	2	1	$\bar{3}$	10
53.21	172	2	1	$\bar{3}$	11
53.71	170.5	2	0	$\bar{2}$	20
54.09	169.4	1	0	$\bar{1}$	26
55.08	166.6	2	1	$\bar{3}$	13
55.36	165.8	3	0	$\bar{3}$	0
56.70	162.2	3	0	$\bar{3}$	6
58.27	158.2	2	1	$\bar{3}$	16



a_0 : 576.4 $\pm$ 1 pm

c_0 : 4920.8 $\pm$ 9 pm

RG : R 3c, R 3c

2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	i	l
10.78	820	0	0	0	6
19.17	462.6	1	0	1	6
21.65	410.1	0	0	0	12
22.92	387.7	1	0	1	8
25.39	350.5	1	0	1	10
31.00	288.2	1	1	2	0 / 0 1 14
31.49	283.9	1	1	2	3
32.73	273.4	0	0	0	18
32.91	271.9	1	1	2	6
34.22	261.8	1	0	1	16
35.17	254.9	1	1	2	9
36.71	244.6	2	0	2	4
38.13	235.8	1	1	2	12
38.91	231.3	2	0	2	8
40.49	222.6	2	0	2	10
40.85	220.7	1	0	1	20
41.68	216.5	1	1	2	15
44.13	205.0	0	0	0	24
44.34	204.1	1	0	1	22
44.48	203.5	1	1	2	18
46.84	193.8	2	0	2	16
48.79	186.5	2	1	3	4
51.60	177.0	1	0	1	26
52.16	175.2	2	0	2	20
54.28	168.9	2	1	3	13
55.1	166.6	3	0	3	0 / 2 0 2 22
56.02	164.0	0	0	0	30
56.37	163.1	3	0	3	6
59.94	154.2	3	0	3	12



a₀ : 578.3 +-1 pm
: 92.64 +-02⁰

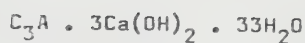
b₀ : 573.8 +-2 pm
β : 101.96+-03⁰

c₀ : 785.5 +-1 pm
: 120.10+-03⁰

RG: P 1, P 7

2 J (Cu K _{α1})	d (pm)	h	k	l
11.69	756.4	0	0	1
18.14	488.6	0	1	0
18.99	466.9	7	0	1
19.79	448.2	0	7	1
20.42	434.5	7	1	1
22.30	398.3	1	7	1
23.51	378.1	0	0	2
24.37	364.9	1	0	1
25.75	345.7	7	0	2
31.29	285.6	7	7	1
31.62	282.7	2	7	0
32.16	278.1	1	1	0
32.84	272.5	1	2	1
33.77	265.2	1	0	2
34.81	257.5	7	7	2
35.40	253.3	2	1	2
35.58	252.1	0	0	3
35.92	249.8	2	0	1
36.12	248.5	2	2	0
36.76	244.3	0	2	0
37.09	242.2	0	7	3
38.44	234.0	1	2	2 / 7 1 3
39.19	229.7	2	2	1
40.21	224.1	0	2	2
42.23	213.8	2	0	1
42.72	211.5	2	1	3
43.16	209.4	0	1	3
43.78	206.6	2	7	2
44.50	203.4	2	0	3
44.75	202.3	1	0	3

2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	l
45.08	200.9	1	1	2
45.50	199.2'	2	$\bar{2}$	2
46.65	194.5	$\bar{1}$	0	4
46.76	194.1	1	$\bar{2}$	3
47.73	190.4	0	2	2
48.08	189.1	0	0	4
48.9	186	3	$\bar{2}$	0 / $\bar{2}$ 2 3
49.92	182.5	$\bar{1}$	1	4
50.69	179.9	$\bar{3}$	2	2
52.21	175.0	$\bar{2}$	1	4
52.94	172.8	$\bar{2}$	0	4
53.40	171.4	1	$\bar{1}$	4
54.18	169.1	2	$\bar{2}$	3
55.05	166.7	0	1	4 / $\bar{3}$ 0 1
56.96	161.5	1	$\bar{2}$	4
57.46	160.2	0	$\bar{3}$	2
58.43	157.8	$\bar{2}$	2	4
58.87	156.7	$\bar{1}$	0	5
59.66	154.8	2	0	3
61.22	151.3	0	0	5 / 1 2 2
62.1	149.3	0	$\bar{3}$	3 / 3 0 1
63.34	146.7	3	$\bar{3}$	2
64.41	144.5	$\bar{4}$	2	1



a_0 : 1090.0 $\pm$ 1 pm

c_0 : 2127.4 $\pm$ 4 pm

2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	i	l
9.35	945	1	0	$\bar{1}$	0
16.24	545.3	1	1	$\bar{2}$	0
18.27	485.2	1	1	$\bar{2}$	2
19.14	463.3	1	0	$\bar{1}$	4
23.35	380.6	1	1	$\bar{2}$	4
25.20	353.1	2	0	$\bar{2}$	4
26.30	338.6	2	1	$\bar{3}$	2
29.36	314.4	3	0	$\bar{3}$	0
30.04	297.2	1	1	$\bar{2}$	6
32.85	272.4	2	2	$\bar{4}$	0
33.05	270.8	3	0	$\bar{3}$	4
34.20	262.0	3	1	$\bar{4}$	0
35.27	254.2	3	1	$\bar{4}$	2
35.67	251.5	2	1	$\bar{3}$	6
37.04	242.5	2	2	$\bar{4}$	4
38.28	234.9	3	1	$\bar{4}$	4
38.84	231.7	2	0	$\bar{2}$	8
41.77	216.1	2	2	$\bar{4}$	6
42.57	212.2	3	2	$\bar{5}$	2
42.90	210.6	3	1	$\bar{4}$	6
45.17	200.6	3	2	$\bar{5}$	4
48.17	188.7	5	0	$\bar{5}$	0
49.87	182.7	2	1	$\bar{3}$	10



a_0 : 1101.5 $\pm$ 1 pm

c_0 : 2123.2 $\pm$ 3 pm

2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	l	l
9.27	953	1	0	$\bar{1}$	0
16.10	550.0	1	1	$\bar{2}$	0
18.14	488.6	1	1	$\bar{2}$	2
18.60	476.6	2	0	$\bar{2}$	0
19.13	463.5	1	0	$\bar{1}$	4
23.26	382.1	1	1	$\bar{2}$	4
25.08	354.8	2	0	$\bar{2}$	4
26.10	341.1	2	1	$\bar{3}$	2
28.05	317.8	3	0	$\bar{3}$	0
29.97	297.9	1	1	$\bar{2}$	6
32.50	275.3	2	2	$\bar{4}$	0
32.82	272.6	3	0	$\bar{3}$	4
34.92	256.7	3	1	$\bar{4}$	2
35.52	252.5	2	1	$\bar{3}$	6
36.76	244.3	2	2	$\bar{4}$	4
37.99	236.6	3	1	$\bar{4}$	4
38.91	231.3	2	0	$\bar{2}$	8
41.20	218.9	3	2	$\bar{5}$	0
41.52	217.3	2	2	$\bar{4}$	6
42.13	214.3	3	2	$\bar{5}$	2
42.63	211.9	3	1	$\bar{4}$	6
43.42	208.2	4	1	$\bar{5}$	0
44.74	202.4	3	2	$\bar{5}$	4
46.84	193.8	4	1	$\bar{5}$	4
47.61	190.8	5	0	$\bar{5}$	0
48.54	187.4	3	1	$\bar{4}$	8
49.79	183.0	2	1	$\bar{3}$	10
50.41	180.9	3	3	$\bar{6}$	2
50.82	179.5	5	0	$\bar{5}$	4

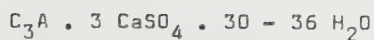
2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	i	l
51.44	177.5	4	0	$\bar{4}$	8
52.62	173.8	1	0	$\bar{1}$	12
53.50	171.1	5	1	$\bar{5}$	0
54.35	168.7	3	2	$\bar{5}$	8
55.40	165.7	3	1	$\bar{4}$	10



a_0 : 1102.2 $\pm$ 1 pm

c_0 : 2138.8 $\pm$ 4 pm

2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	i	l
9.26	955	1	0	$\bar{1}$	0
16.07	551.1	1	1	$\bar{2}$	0
16.56	534.7	0	0	0	4
18.09	489.9	1	1	$\bar{2}$	2
19.01	466.5	1	0	$\bar{1}$	4
23.16	383.8	1	1	$\bar{2}$	4
24.65	360.8	2	1	$\bar{3}$	0
24.97	356.3	2	0	$\bar{2}$	4
26.04	341.8	2	1	$\bar{3}$	2
28.02	319.2	3	0	$\bar{3}$	0
29.82	299.3	1	1	$\bar{2}$	6
32.46	275.6	2	2	$\bar{4}$	0
32.72	273.4	3	0	$\bar{3}$	4
33.56	266.8	2	2	$\bar{4}$	2
33.83	264.7	3	1	$\bar{4}$	0
34.88	257.0	3	1	$\bar{4}$	2
35.37	253.6	2	1	$\bar{3}$	6
36.66	244.9	2	2	$\bar{4}$	4
37.89	237.3	3	1	$\bar{4}$	4
41.38	218.0	2	2	$\bar{4}$	6
42.08	214.5	3	2	$\bar{5}$	2
42.50	212.5	3	1	$\bar{4}$	6
44.26	204.5	4	1	$\bar{5}$	2
44.68	202.6	3	2	$\bar{5}$	4
46.76	194.1	4	1	$\bar{5}$	4
49.50	184.0	2	1	$\bar{3}$	10
51.27	178.0	4	0	$\bar{4}$	8



$a_0 : 1122.9 \pm 1 \text{ pm}$

$c_0 : 2152.8 \pm 4 \text{ pm}$

RG : P 31c, P 31c

2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	i	l
9.09	973	1	0	$\bar{1}$	0
15.77	561.5	1	1	$\bar{2}$	0
16.46	538.2	0	0	0	4
17.80	497.8	1	1	$\bar{2}$	2
18.23	486.2	2	0	$\bar{2}$	0
18.83	470.9	1	0	$\bar{1}$	4
22.87	388.5	1	1	$\bar{2}$	4
24.19	367.6	2	1	$\bar{3}$	0
24.65	360.8	2	0	$\bar{2}$	4
25.59	347.8	2	1	$\bar{3}$	2
27.49	324.2	3	0	$\bar{3}$	0
29.52	302.3	1	1	$\bar{2}$	6
31.85	280.7	2	2	$\bar{4}$	0
32.21	277.7	3	0	$\bar{3}$	4
32.95	271.6	2	2	$\bar{4}$	2
33.19	269.7	3	1	$\bar{4}$	0
34.24	261.6	3	1	$\bar{4}$	2
34.92	256.7	2	1	$\bar{3}$	6
36.05	248.9	2	2	$\bar{4}$	4
37.26	241.1	3	1	$\bar{4}$	4
38.19	235.4	2	0	$\bar{2}$	8
40.78	221.1	2	2	$\bar{4}$	6
41.29	218.5	3	2	$\bar{5}$	2
41.87	215.6	3	1	$\bar{4}$	6
42.99	210.2	1	0	$\bar{1}$	10
43.89	206.1	3	2	$\bar{5}$	4
45.93	197.4	4	1	$\bar{5}$	4
46.07	196.8	2	0	$\bar{2}$	10
48.99	185.8	2	1	$\bar{3}$	10



$a_0: 1085.5 \pm 2 \text{ pm}$

$c_0: 2123.0 \pm 1.0 \text{ pm}$

$2\theta (\text{Cu } K_{\alpha 1})$	$d \text{ (pm)}$	h	k	i	l
9.40	940	1	0	1	0
16.32	542.8	1	1	2	0
16.69	530.7	0	0	0	4
18.34	483.2	1	1	2	2
19.19	462.2	1	0	1	4
23.42	379.5	1	1	2	4
25.04	355.3	2	1	3	0
25.29	351.9	2	0	2	4
26.43	336.9	2	1	3	2
28.46	313.4	3	0	3	0
30.12	296.4	1	1	2	6
32.98	271.4	2	2	4	0
33.17	269.8	3	0	3	4
34.07	262.9	2	2	4	2
34.37	260.7	3	1	4	0
35.42	253.2	3	1	4	2
35.78	250.7	2	1	3	6
37.18	241.6	2	2	4	4
38.34	234.6	3	0	3	6
41.92	215.3	2	2	4	6
42.75	211.3	3	2	5	2
43.06	209.9	3	1	4	6
44.11	205.1	4	1	5	0
45.35	199.8	3	2	5	4
48.93	186.0	3	1	4	8
50.00	182.2	2	1	3	0
51.93	175.9	4	0	4	8



a_0 : 590.4 +- .1 pm

c_0 : 4873,1 +- .6 pm

2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	l	l
10.88	812.5	0	0	0	6
21.87	406.0	0	0	0	12
22.69	391.6	1	0	$\bar{1}$	8
30.25	295.2	1	1	$\bar{2}$	0
32.24	277.4	1	1	$\bar{2}$	6
34.58	259.2	1	1	$\bar{2}$	9
35.86	250.2	2	0	$\bar{2}$	4
37.64	238.8	1	1	$\bar{2}$	12
38.14	235.8	2	0	$\bar{2}$	8
41.00	219.9	1	0	$\bar{1}$	20
43.90	206.1	2	0	$\bar{2}$	14
44.59	203.0	0	0	0	24
45.42	199.5	1	1	$\bar{2}$	18
51.88	176.1	2	0	$\bar{2}$	20
51.97	175.8	1	0	$\bar{1}$	26


 $a_0: 585.8 \pm .2 \text{ pm}$
 $c_0: 2328.5 \pm 1.2 \text{ pm}$

2θ (Cu $K_{\alpha 1}$)	d (pm)	h	k	l	l
11.36	778	0	0	0	3
22.85	388.8	0	0	0	6
23.24	382.4	1	0	$\bar{1}$	4
30.49	292.9	1	1	$\bar{2}$	0
32.65	274.0	1	1	$\bar{2}$	3
36.21	247.9	2	0	$\bar{2}$	2
38.47	233.8	1	1	$\bar{2}$	6
42.69	211.6	1	0	$\bar{1}$	10
46.81	193.9	1	1	$\bar{2}$	9
54.19	169.1	3	0	$\bar{3}$	0
55.57	165.2	3	0	$\bar{3}$	3

6. LITERATUR

van AARDT, J.H.P. & WISSER, S.:

Thaumasite formation : a cause of deterioration of Portland cement and related substances in the presence of sulphates
Cem. Concr. Res. 5, (1975), 225 - 232

ADLER, H.H. & KERR, P.F.:

Infrared study of Aragonite and Calcite
Am. Miner. 47, (1962), 700 - 717

ADLER, H.H. & KERR, P.F.:

Infrared spectra, symmetry and structure relations of some carbonate minerals
Am. Miner. 48, (1963), 839 - 853

ADLER, H.H. & KERR, P.F.:

Variations in infrared spectra, molecular symmetry and site symmetry of sulphate minerals
Am. Miner. 50, (1965), 133 - 147

AHMED, S.J. & TAYLOR, H.F.W.:

Crystal structures of the lamellar Calcium Aluminate Hydrates
Nature 215, (1967), 622 - 623

AHMED, S.J., DENT GLASSER, L.S. & TAYLOR, H.F.W.:

Crystal structures and reactions of C_4AH_{12} and derived basic salts
Proc. V. Int. Symp. Chem. Cem., Tokyo 1968
II - 77, 118 - 127 (Suppl. Papers)

AKHAMANOVA, M.V.:

Investigation of the structure of native Borates by infrared absorption spectroscopy
J. Struct. Chem. 3, (1962), 27 - 28

ALBECK, J.:

Die Bindung von Calciumchlorid und Calciumsulfat bei der Hydratation der aluminatisch - ferritischen Klinker-mineralien sowie verschiedener Klinker und von Hüttensand in Gegenwart von Calciumhydroxid
Dissertation Aachen 1970

ALBRECHT, W. & MANNHERZ, U.:

Zusatzmittel, Anstrichstoffe, Hilfsstoffe für Beton und Mörtel
WIESBADEN 1967

ALLMANN, R. & LOHSE, H.H.:

Die Kristallstruktur des Sjögrenits und eines Umwandlungsproduktes des Koenenits
N. Jb. Miner., Mh., (1966), 161 - 181

ALLMANN, R.:

The crystal structure of Pyroaurite
Acta Cryst. B 24, (1968), 972 - 977

ALLMANN, R.:

Magnesium Aluminium Carbonate Hydroxide Tetrahydrate:
a discussion
Am. Miner. 53, (1968), 1057 - 1059

ALLMANN, R.:

Die Doppelschichtstruktur der plättchenförmigen Calcium - Aluminium - Hydroxisalze am Beispiel des $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaSO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$
N. Jb. Miner., Mh. (1968), 140 - 144

ALLMANN, R.:

Doppelschichtstrukturen mit brucitähnlichen Schichtionen
 $\{\text{Me(II)}_{1-x}\text{Me(III)}_x(\text{OH})_2\}^{x+}$
Chimia 24, (1970), 99 - 108

ALLMANN, R.:

Das Bindungsprinzip der Doppelschichtstrukturen mit brucit-
ähnlichen Schichtionen

Fortschr. Miner. (1971), 24 - 30

ALLMANN, R.:

Refinement of the hybrid layer structure $\{Ca_2Al(OH)_6\}$
 $\{1/2 SO_4 \cdot 3H_2O\}$

N. Jb. Miner., Mh., (1977), 136 - 144

ANDREEVA, E.P. & SEGALOVA, E.E.:

Investigation of crystallisation structure formation in
calcium hydrochloroaluminate

Colloid Journal 22, (1960), 395 - 400

ARUJA, E.:

The unit cell and space group of $4CaO \cdot Al_2O_3 \cdot 19H_2O$ polymorphs

Acta Cryst. 14, (1961), 1213 - 1216

ARUJA, E.:

A humidity and temperature controlled specimen holder for
a focusing X-ray diffraction camera

J. scient. Instr. 39, (1962), 393

ASSARSSON, G.:

Untersuchungen über Calciumaluminat I - III

Die Kristallisation der Calciumaluminatlösungen bei 20/40/90°C

Z. anorg. allg. Ch

Teil I : 200, (1931), 385 - 408

Teil II : 205, (1932), 335 - 360

Teil III: 214, (1932), 158 - 166

BANNISTER, F.A.:

Ettringite from Scawt Hill, Co Antrim

Min. Mag. 24, (1936), 324 - 329

BARTL, H. & SCHELLER, Th.:

Zur Stuktur des $C_{12}A_7$

N. Jb. Miner., Mh., (1970), 547 - 552

BAUER, H.:

Über die Diadochie zwischen Aluminium und Bor in Gehlenit

N. Jb. Miner., Mh., (1968), 127 - 140

BECHER, H.J.:

Schwingungsspektroskopische Untersuchungen an Festkörper-
verbindungen

Angew. Chemie 84, (1972), 8 - 15

BENSTED, J. & VARMA, S.P.:

Studies of Ettringite and its derivatives

Part I : Cem. Techn. 2, (1971), 73 - 76

Part II : Silic. Ind. 31, (1972), 315 - 318

Part III: Cem. Techn. 3, (1972), 185 - 187

Part IV : Cem. Techn. 4, (1973), 112 - 116

BENSTED, J. & VARMA, S.P.:

Some applications of infra-red and Raman spectroscopy
in cement chemistry

Part I : Cem. Techn. 5, (1974), 256 - 261

Part II : Cem. Techn. 5, (1974), 378 - 382

Part III: Cem. Techn. 5, (1974), 440 - 450

BENSTED; J.:

The potential for Raman spectroscopy in cement chemistry

Cem. Techn. 6, (1975), 161 - 164

BENSTED, J.:

Use of Raman spectroscopy in cement chemistry

J. Am. Ceram. Soc. 59, (1976), 140 - 143

BENSTED, J. & VARMA, S.P.:

A discussion of the paper: Thaumasite formation ...

by van AARDT & VISSER

Cem. Concr. Res. 6, (1976), 321 - 322

BENSTED, J. & VARMA, S.P.:

A discussion of the paper: Thaumasite formation ...

by van AARDT & VISSER

Cem. Concr. Res. 6, (1976), 321 - 322

BENSTED, J.:

An investigation of Calcium nitroaluminate hydrate and
its derivatives

Cem. Techn. 7, (1976), 3 - 6

BENSTED, J.:

Raman spectral studies of carbonation phenomena

Cem. Concr. Res. 7, (1977), 161 - 164

BENSTED, J. & VARMA, S.P.:

Infrared and Raman spectroscopy in cement chemistry -
miscellaneous applications

World Cem. Techn. 8, (1977)

BENSTED, J.:

Effect of accelerator additives on the early hydration
of Portland cement

Il Cemento 75, (1978), 13 - 20

BENSTED, J.:

Early hydration behaviour of Portland cement in water,
Calcium chloride, and Calcium formate solutions

Part I : Sil. Ind. 43, (1978), 117 - 122

Part II : Sil. Ind. 43, (1978), 219 - 221

Part III: Sil. Ind. 45, (1980), 5 - 10

BENSTED, J.:

Some instrumental investigations of Portland cement hydration

Part I : Il Cemento 76, (1979), 67 - 74

Part II : Il Cemento 76, (1979), 117 - 126

BENSTED, J. & VARMA, P.S.:

Studies of Thaumasite

Part I : Sil. Ind. 38, (1973), 29 - 32

Part II : Sil. Ind. 39, (1974), 11 - 19

BENSTED, J.:

Some hydration investigations involving Portland cement -
effect of Calcium carbonate substitution of gypsum
World Cem. Techn. 11, (1980), 395 - 406

BEN-YAIR, M.:

Studies on the stability of Calcium sulphoaluminates
Isr. J. Chem. 7, (1969), 659 - 665

BEN-YAIR, M.:

Studies on the stability of Calcium chloroaluminates
Isr. J. Chem. 9, (1971), 529 - 536

BERMAN, H.A. & NEWMAN, E.S.:

Heat of formation of Calcium Aluminate Monocarbonate at 25°C
J. Res. NBS A 65, (1961), 197 - 207

BERMAN, H.A. & NEWMAN, E.S.:

Heat of formation of Calcium Aluminate Monosulfate at 25°C
J. Res. NBS A 67, (1963), 1 - 13

BERMAN; H.A.:

Heat of formation of Calcium Aluminate Tricarbonate at 25°C
J. Res. NBS A 69, (1965), 407 - 416

BERRY, L.G.:

The unit cell of Ettringite

Am. Miner. 48, (1963), 939 - 940

BESSEY, G.E.:

The Calcium aluminate and silicate hydrates

Proc. Symp. Chem. Cem., Stockholm (1939), 179 - 230

BEZJAK, A. & JELENIC, I.:

Crystal structure investigation of Calcium Aluminium sulphate hydrate - Ettringite

Croat. Chem. Acta 38, (1966), 239 - 242

BOKII, G.B. & KRAVCHENKO, V.B.:

Crystal-chemical classification of Borates

J. Struct. Chem. 7, (1966), 860 - 877

BONZEL, J.:

Beton mit hohem Frost- und Tausalz widerstand

Betontechn. Berichte, (1965), 469 - 474 und 509 - 515

BRANDENBERGER, E.:

Kristallstrukturelle Untersuchungen an Calcium-Aluminat-hydraten

Schw. Min. Petr. Mitt. 13, (1933), 569 - 570

BRANISKI, A.:

Grundlegende Unterschiede zwischen Calcium-, Strontium- und Bariumzementen

ZKG 22, (1969), 513 - 516

BREVAL, E.:

The effects of prehydration on the liquid hydration of

$3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$ with $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

J. Am. Ceram. Soc. 62, (1979), 395 - 398

BROADHEAD, P. & NEWMAN, G.A.:

The vibrational spectra of orthoboric acid and its thermal decomposition products

J. Mol. Struct. 10, (1971), 157 - 172

BUHLERT, R.:

Diadochiebeziehungen im Ettringit $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 30\text{H}_2\text{O}$
Dissertation Frankfurt/M. 1971

BUHLERT, R. & KUZEL, H.-J.:

Über den Einbau von Cr^{3+} und Fe^{3+} in Ettringit
ZKG 24, (1971), 83 - 85

BUTT, Y.M., KOLBASOV, V.M. & TOPIL'SKII, G.V.:

The formation and properties of Calcium hydroaluminate
 $4\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 19\text{H}_2\text{O}$
Inorg. Mat. 4, (1968), 489 - 493

BUTTLER, F.G.:

Studies on hydrated Calcium Aluminates
Dissertation Aberdeen 1958

BUTTLER, F.G., DENT GLASSER, L.S. & TAYLOR, F.H.W.:

Studies on $4\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 13\text{H}_2\text{O}$ and the related natural
mineral Hydrocalumite
J. Am. Ceram. Soc. 42, (1959), 121 - 126

CAPELLE, R.:

Le dosage du bore (Bibliographie)
Chimie analytique 45, (1963), 303 - 315

CAPPONI, J.J., CHENAVAS, J. & JOUBERT, J.C.:

Nouveaux borates d'aluminium et de gallium obtenus par
synthèse hydrothermale à haute pression
Bull. Soc. fr. Min. Cristallogr. 95, (1972), 412 - 417

CARLSON, E.T.:

The system $\text{CaO} - \text{B}_2\text{O}_3$
J. Res. NBS 9, (1933), 825 - 832

CARLSON, E.T. & BERMAN, H.A.:

Some observations on the Calcium Aluminate Carbonate Hydrates
J. Res. NBS 64 A, (1960), 333 - 341

CANDLOT, F.:

Rôle du chlorure de calcium et du sulfate de chaux sur la
prise et le durcissement des mortiers
Tonind. Ztg. (1892), 867 - 890

CARPENTER, A.B.:

Am. Miner. 48, (1963), 1394
zit. bei EDGE & TAYLOR (1971)

CHRIST, C.L. & CLARK, J.R.:

A crystal-chemical classification of Borate structures
with emphasis on hydrated Borates
Phys. Chem. Miner. 2, (1977), 59 - 87

CLARK, J.R.:

Chrystal chemistry of Borates
Am. Chem. Soc., Pittsburgh 11, (1971), 187 - 193

COLLEPARDI, M., BALDINI, G. & PAURI, M.:

Retardation of Tricalcium Aluminate Hydration by Calcium
Sulphate
J. Am. Ceram. Soc. 62, (1979), 33 - 35

COURTOIS, A., DUSAUSOY, Y., LAFAILLE, A. & PROTAS, J.:

Compt. Rend. Acad. Sci. Paris, 266, (1968), 1911
zit. bei MOORE & TAYLOR (1969)

CROWLEY, M.S.:

Effect of starting materials on phase relations in the
system $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{H}_2\text{O}$
J. Am. Ceram. Soc. 47, (1964), 144 - 148

DANOWSKI, W.:

Untersuchungen der Infrarot - Absorption und der Leitfähigkeit
bei der Bildung der Kalziumaluminat - Doppelsalze

Dissertation Weimar 1966

D'ANS, J. & EICK, H.:

Das System $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{CaSO}_4 - \text{H}_2\text{O}$ bei 20°C

ZKG 6, (1953), 302 - 311

D'ANS, J. & EICK, H.:

Das System $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{H}_2\text{O}$ bei 20°C und das Erhärten der
Tonerdezemente

ZKG 6, (1953), 197 - 210

DARR, G.M. & LUDWIG, U.:

The incorporation of chloride in calcium aluminate hydrates

Ind. Chim. Belg. 39, (1974), 687 - 692

DEGENHARDT, H.:

Filmuniverselle Verstärkerfolien mit Zweibanden-Leuchtstoff
Titan 2

Electromedica 3, (1981), 154 - 158

DOSCH, W.:

Untersuchungen in den Alkali enthaltenden Systemen, gebildet
aus den Komponenten CaO , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , SiO_2 , SO_3 , Na_2O ,
 K_2O , H_2O

Dissertation Mainz 1962

DOSCH, w. & zur STRASSEN, H.:

Untersuchung von Tetracalciumaluminathydraten

I. Die verschiedenen Hydratstufen und der Einfluß der
Kohlensäure

ZKG 18, (1965), 233 - 237

DOSCH, W.:

Röntgenfeinstrukturuntersuchung luftempfindlicher
Pulverpräparate

ZKG 18, (1965), 226 - 232

DOSCH, W. & zur STRASSEN, H.:

Ein alkalihaltiges Calciumaluminatsulfathydrat

ZKG 22, (1967), 392 - 401

DOSCH, W.:

Die innerkristalline Sorption von Wasser und organischen
Substanzen an TCAH

N. Jb. Miner., Abh., (1967), 200 - 239

DOSCH, W.:

Mineralogische Adsorber für Ultragifte

Fortschr. Miner. 56, (1978), Beih. 1, 15 - 16

DOSCH, W. & KOESTEL, H.C.:

Stabilisierte Dicalciumaluminathydrate

Beschreibung zum Patentgesuch 2433363

DUNN, P.J., PEACOR, D.R., LEAVENS, P.B. & BAUM, J.L.:

Charlesite, a new mineral of the ettringite group,
from Franklin, New Jersey

Am. Miner. 68, (1983), 1033 - 1037

DURIEZ, M.:

Die Betonzusatzmittel

Betonstein - Ztg 3, (1958), 122 - 135

ECKER, E.:

Über wasserfreie Borate einiger Übergangsmetalle

Dissertation Karlsruhe 1966

EDGE, R.A. & TAYLOR, H.F.W.:

Crystal structure of Thaumasite, a mineral
containing $\text{Si}(\text{OH})_6^{2-}$ - groups

Nature 224, (1969), 363 - 364

EDGE, R.A. & TAYLOR, H.F.W.:

Crystal structure of Thaumasite $\text{Ca}_3\text{Si}(\text{OH})_6 \cdot 12\text{H}_2\text{O}(\text{SO}_4)(\text{CO}_3)$

Acta cryst. B 27, (1971), 594 - 601

EDWARDS, J.O., MORRISON, G.C., ROSS, V.F. & SCHULTZ, J.W.:

The structure of the aqueous borate ion

J. Am. Chem. Soc. 77, (1955), 266 - 268

EDWARDS, J.O. & ROSS, V.F.:

Structural principles of the hydrated polyborates

J. Inorg. Nucl. Chem. 15, (1960), 329 - 337

EICK, H.:

Über die Calciumaluminatsulfathydrate

ZKG 17, (1964), 169 - 171

ELSNER von GRONOW, H.:

Die kleinen Beimengungen in den Zementen

ZKG 1, (1945), 85 - 87

EMSCHWILLER, G., HENRY, L., RABOT, R. & MOUNIER, M.:

Sur les spectres infrarouges d'aluminates de calcium hydratés

J. Chim. Phys. 59, (1962), 419 - 421

ERLIN, B. & STARK, D.C.:

Identification and occurrence of Thaumasite in concrete

Highway Res. Record 113, (1965), 108 - 113

FARMER, W.C.:

The infrared spectra of minerals

London 1974

FEITKNECHT, W.:

Zur Kenntnis der Doppelhydroxide und basischen Doppelsalze
Teil II und III

Helv. Chim. Acta 25, (1942), 106 - 131 und 131 - 137

FEITKNECHT, W. & BUSER, H.:

Zur Kenntnis der nadeligen Calcium - Aluminium - Hydroxisalze

Helv. Chim. Acta 32, (1949), 2298 - 2305

FEITKNECHT, W. & BUSER, H.:

Über den Bau der plättchenförmigen Calcium - Aluminium -
Hydroxisalze

Helv. Chim. Acta 34, (1951), 128 - 142

FELDMAN, R.F. & RAMACHANDRAN, V.S. & SEREDA, P.J.:

Influence of CaCO_3 on the hydration of $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$

J. Am. Ceram. Soc. 48, (1965), 25- 30

FELDMAN, R.F. & RAMACHANDRAN, V.S.:

Charakter of hydration of $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$

J. Am. Ceram. Soc. 49, (1966), 268 - 273

FIERENS, P. & TIERLOCQ, J.:

Nature and concentration effect of stabilizing elements
of Beta - Dicalcium Silicate on its hydration rate

Cem. Concr. Res. 13, (1983), 267 - 276

FISCHER, R.:

Mischkristallbildung in den Systemen $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ -
 $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}$ und $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O} -$
 $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaSO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2\text{O}$

Diplomarbeit Frankfurt/M. 1972

FISCHER, R.:

Über den Einbau von CO_3^{2-} in laminare Erdalkalialuminathydrate
Dissertation Erlangen 1977

FISCHER, R., KUZEL, H.-J. & SCHELLHORN, H.:

Hydrocalumit: Mischkristalle von "Friedelschem Salz"

$3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaCl}_2 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ und Tetracalciumaluminathydrat

$3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$

N. Jb. Miner., Mh., (1980), 322 - 334

FISCHER, R. & KUZEL, H.-J.:

Reinvestigation of the system $\text{C}_4\text{A} \cdot n\text{H}_2\text{O} - \text{C}_4\text{A} \cdot \text{CO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$

Cem. Concr. Res. 12, (1982), 517 - 526

FLINT, E.P. & WELLS, L.S.:

Analogy of hydrated calcium silicoaluminates and hexa-calciumaluminate to hydrated calcium sulphoaluminate

J. Res. NBS 33, (1944), 471 - 478

FONT - ALTABA, M.:

A thermal study of Thaumasite

Min. Mag. 32, (1961), 567 - 572

FOORD, E., ERD, R. & HUNT, G.:

New data for Jeremejevite

Can. Miner. 19, (1981), 303 - 310

FREY, R., FUNK, D. & GEIGER, R.:

Reaktionschemischer Einfluß von Zucker auf die Verfestigungseigenschaften von Mörteln

TIZ - Fachber. 108, (1984), 35 - 38

FRICKE, R. & SCHMÄH, H.:

Einfache Darstellung von gut durchgebildetem Bayerit

Ztschr. Nat.forsch. 1, (1946), 323

FRIEDEL, A.:

Sur un chloro-aluminate de calcium hydraté se maclant par compression

Bull. Soc. franc. Miner. 20, (1897), 122 - 136

FRIES, J. & GETROST, H.:

Organische Reagenzien für die Spurenanalyse
Darmstadt 1975

FRONDEL, C.:

Constitution and polymorphism of the Pyroaurite and
Sjögrenite group

Am. Miner. 26, (1941), 295 - 315

FUJII, K., KONDO, W. & WANATABE, T.:

Über die Hydratation von Portlandzement sofort nach
dem Anmachen

ZKG 23, (1970), 72 - 79

CAUDEFROY, C., GRANGER, M.M., PERMINGEAT, F. & PROTAS, J.:

La Despujolsite, une nouvelle espèce minérale

Bull. Soc. franc. Miner. Cristall. 91, (1968), 43 - 50

GLASSER, L.S. DENT:

Refractive index, density and the coordination number of Al
Cem. Concr. Res. 7, (1977), 395 - 398

GMELIN, L.:

Gmelins Handbuch der anorganischen Chemie

Bor, Ergänzungsband (1954)

Borverbindungen 7 (1975)

Weinheim/Bergstraße

GOLDSCHMIDT, V.M. & HAUPTMANN, H.:

Isomorphie von Boraten und Karbonaten

Nachr. Ges. Wiss. Göttingen (1932), 53 - 72

GOUDA, G.R., ROY, D.M. & SARKAR, A.:

Thaumasite in deteriorated soil - cements

Cem. Concr. Res. 5, (1975), 519 - 522

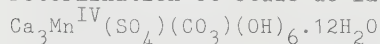
GOULDEN, J.D.S.:

Infrared spectroscopy of aqueous solutions

Spectrochim. Acta 9, (1959), 657 - 671

GRANGER, M.M. & PROTAS, J.:

Détermination et étude de la structure de la Jouravskite



Acta Cryst. B 25, (1965), 1943 - 1951

GRÜNHAGEN, H. & MERGOIL, J.:

Découverte d'Hydrocalumite et Afwillite associées à l'Ettringite dans les porcelainites de Boisséjour près Ceyrat (Puy-de-Dôme)

Bull. Soc. Franc. Miner. Cristall. 86, (1963), 149 - 157

GÜNZLER, H. & BÜCK, H.:

Infrarotspektroskopie

Weinheim/Bergstraße 1975

GUPTA, P., CHATTERJI, S. & JEFFERY, J.W.:

Studies of the effects of various additives on the hydration reaction of tricalcium aluminate

Cem. Techn.

Part I : (1970), 59 - 66

Part II : (1972), 18 - 26

Part III: (1972), 146 - 153

Part IV : (1973), 63 - 69

GUTT, W. & NURSE, R.W.:

The phase composition of Portland cement clinker

VI. Int. Congr. Chem. Cem. Moscow (1974)

HANSEN, W.C.:

A discussion of the paper: "Scanning electron micrographic studies of Ettringite formation" by P.K. MEHTA

Cem. Concr. Res. 6, (1976), 595 - 596

HART, P.B. & BROWN, C.S.:

The synthesis of new calcium borate compounds by
hydrothermal methods

J. Inorg. Nucl. Chem. 24, (1962), 1057 - 1065

HART, P.B. & SMALLWOOD, S.E.F.:

An examination of the infrared spectra of Borate anions

J. Inorg. Nucl. Chem. 24, (1962), 1047 - 1056

HARTERT, E. & GLEMSER, O.:

Ultrarotspektroskopische Bestimmung der Metall - Sauerstoff -
Abstände in Hydroxiden, basischen Salzen und Salzhydraten

Z. Electrochem. 60, (1956), 746 - 751

HENNING, O.:

Bildung, Struktur und Hydratation der Erdalkalialuminate
und Tonerdezemente

Habilitationsschrift Weimar 1966

HENNING, O.:

Über die Infrarotabsorption von Wassermolekülen und

OH - Gruppen in anorganischen Verbindungen

Wiss. Ztschr. d. Hochsch. f. Architektur u. Bauwesen Weimar
15, (1968), 53 - 61

HENNING, O. & WAGNER, H.:

Infrarot - Untersuchungen von Calciumaluminatphosphathydraten

Wiss. Ztschr. d. Hochsch. f. Architektur u. Bauwesen Weimar
15, (1968), 179 - 184

HENNING, O.:

Möglichkeiten zur Beschleunigung des Verfestigungsprozesses
von Bindemitteln

Wiss. Ztschr. d. Hochsch. f. Architektur u. Bauwesen Weimar
25, (1978), 490 - 495

HERTING, S. & STRUNZ, H.:

Jeremejewit von Cape Cross in SW - Afrika

Aufschluß 29, (1978), 45 - 53

HODAWAND - KHANI, M. & DOSCH, W.:

Strontiumaluminatsulfate

Fortschr. Miner. 53, (1975), Beih. 1, 30

HÖRKNER, W. & MÜLLER - BUSCHBAUM, H.K.:

Zur Kristallstruktur von CaAl_2O_4

J. Inorg. Nucl. Chem. 38, (1976), 983 - 984

HOUTEPEN, C.J.M. & STEIN, H.N.:

An i.r. investigation on some calcium aluminate hydrates

$\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6 \cdot \text{X}^- \cdot y\text{H}_2\text{O}$

Spectrochim. Acta 32 A, (1976), 1409 - 1414

HURLBUT, C.S. & BAUM, L.S.:

Etringite from Franklin, New Jersey

Am. Miner. 45, (1960), 1137 - 1143

IVANOVA, E.V., ANDREEVA, E.P. & STUKALOVA, N.P.:

Adsorption interactions in hydration of individual binders in carbohydrate solutions

Colloid Journal 42, (1980), 35 - 39

IVANOVA, E.V., ANDREEVA, E.P., STUKALOVA, N.P. & TIKHONOVA, O.V.:

Influence of sucrose on hydration of tetracalcium aluminoferrite in dilute suspensions

J. appl. Chem. USSR 53, (1980), 158 - 161

JEEVARATNAM, J., DENT Glasser, L.S. & GLASSER, F.P.:

Structure of Calcium Aluminate $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$

Nature 194, (1962), 764 - 765

JERSZOW, L.D.:

Krystalochemiczne zasady otrzymywania zsybkotwardniejacych cementów portlandzkich wysokich marek
(" Kristallchemische Verfahren, um aus normalen Portland-
zementen hochwertige schnellhärtende Zemente herzustellen")
Cement Wapno Gips 22, (1967), 353 - 355

JOISEL, A.:

Activité chimique des Adjuvants: accélérateurs et retardateurs
Int. Symp. on Admixtures for Mortar and Concrete
RILEM - ABEM, Topic II, Bruxelles 1967

JONES, F.E.:

The calcium aluminate complex salts
Proc. Symp. Chem. Cem. Stockholm (1939), 231 - 245

JONES, F.E.:

The quaternary system $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{CaSO}_4 - \text{H}_2\text{O}$ at 25°C
J. Phys. Chem. 48, (1944), 311 - 350

JONES, F.E. & ROBERTS, M.H.:

The system $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{H}_2\text{O}$ at 25°C
Build. Res., Curr. Pap., Res. Ser. 1, (1962)

KEIL, F.:

Zement
Berlin 1971

KELLER, H.:

Anorganische Anionenaustauschreaktionen an $\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6(\text{OH})\cdot\text{aq}$
und davon abgeleitete Mischkristalle
Dissertation Mainz 1971

KIROV, G.N. & POULIEFF, C.N.:

On the infra-red spectrum and thermal decomposition
products of Thaumasite $\text{Ca}_3\text{H}_2(\text{CO}_3/\text{SO}_4)\text{SiO}_4\cdot 13\text{H}_2\text{O}$
Min. Mag. 36, (1968), 1003 - 1011

KNILL, D. & YOUNG, B.R.:

Thaumasite from Co. Down, Northern Ireland

Min. Mag. 32, (1961), 416 - 418

KOENNE, W.:

Erstarrungsstörungen durch Metalloxyde

ZKG 14, (1961), 158 - 160

KOLLMANN, H., STRÜBEL, G. & TROST, F.:

Experimentelle Untersuchungen über Treibkernbildungen

Giessener geol. Schriften 9, (1976)

KOLLMANN, H., STRÜBEL, G. & TROST, F.:

Reaktionsmechanismen zur Bildung von Treibkernen in Kalk - Gips - Putzen durch Ettringit und Thaumasit

ZKG 5, (1977), 224 - 228

KOSSIVAS, T.G.:

Verfahren zur Beschleunigung des Abbindens von Portlandzement sowie hierfür geeignete Mischungen

Offenlegungsschrift 2 114 081; Offenlegungstag 14.10.1977

KRAMER, H.:

Determination of Boron in silicates after ion exchange separation

Anal. Chemistry 27, (1955), 144 - 145

KRENKLER, K.:

Chemie des Bauwesens

Bd I : Anorganische Chemie

Berlin 1980

KÜHL, H.:

Zementchemie

Band I, II, III

Berlin 1956, 1958, 1961

KUZEL, H.-J.:

Synthese und Röntgenuntersuchung des $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaSO}_4 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$
N. Jb. Miner., Mh., (1965), 193 - 197

KUZEL, H.-J.:

Röntgenuntersuchungen im System $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaSO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ -
 $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ - H_2O
N. Jb. Miner., Mh., (1966), 193 - 200

KUZEL, H.-J.:

Über die Diadochie von Al^{3+} , Cr^{3+} und Fe^{3+} in
 $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ oberhalb 50°C
N. Jb. Miner., Mh., (1967), 87 - 96

KUZEL, H.-J.:

Ersatz von Al^{3+} durch Cr^{3+} und Fe^{3+} in $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$
und $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaSO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$
ZKG 21, (1968), 493 - 499

KUZEL, H.-J.:

X-ray investigation of some complex calcium aluminate hydrates
and related compounds
Proc. V. Int. Symp. Chem. Cem. Tokyo (1968), II-19, 92 - 97

KUZEL, H.-J.:

Beitrag zur Kristallchemie der Calciumaluminathydrate
Habilitationsschrift Frankfurt/M. 1969

KUZEL, H.-J.:

Über die orientierte Entwässerung von Tricalciumaluminat-
hexahydrat $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
N. Jb. Miner., Mh., (1969), 397 - 404

KUZEL, H.-J. & KIENE, H.:

Ein einfacher Heizaufsatz für Pulverdiffraktometer bis 800°C
N. Jb. Miner., Mh., (1969), 235 - 239

KUZEL, H.-J.:

Über die Hydratstufen der Hydroxisalze $3\text{CaO} \cdot \text{Me}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$
und $3\text{CaO} \cdot \text{Me}_2\text{O}_3 \cdot \text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$

N. Jb. Miner., Mh., (1970), 363 - 374

KUZEL, H.-J.:

Zur Frage der Mischkristallbildung von Calciumaluminium-
hydroxisalzen

N. Jb. Miner., Mh., (1971), 477 - 491

KUZEL, H.-J.:

Erdalkaliborate mit hydraulischen Eigenschaften

ZKG 32, (1979), 182 - 185

LAFARGE, CEMENTS, S.A., Paris

Verfahren zum Stabilisieren von Aluminiumoxyd- (Tonerde-)zementen,
danach erhaltene stabilisierte Zemente und ihre Anwendung
Offenlegungsschrift 1 771 911 (1972)

LEA, F.M.:

The chemistry of cement and concrete

London 1970

LE BEL, F. & GRASLAND; G.:

Quaternary Calcium Aluminate Hydrates

(Crystal structure of calcium aluminate monobromide hydrate)

Proc. V. Int. Symp. Chem. Cem., Tokyo 1968, II-14, 79 - 83

LEHMANN, J.:

Über den Ettringit, ein neues Mineral in Kalkeinschlüssen
der Lava von Ettringen

N. Jb. Miner., (1874), 273 - 275

LEHMANN, H.-A.:

Die Hydrogenmonoborate des Calciums

Z. anorg. allgem. Chemie 296, (1958), 199 - 207

LEIFELD, G., MÜNCHBERG, W. & STEGMAIER, W.:

Ettringit und Thaumazit als Treibursache in Kalk - Gips -
Putzen

ZKG 23, (1970), 174 - 177

LERCH, W., ASHTON, F.W. & BOGUE, R.H.:

The sulphoaluminates of calcium

J. Res. NBS 2, (1929), 715 - 731

LIEBER, W. & RICHARTZ, W.:

Einfluß von Triäthanolamin, Zucker und Borsäure auf das
Erstarren und Erhärten von Zementen

ZKG 25, (1972), 403 - 409

LIEBER, W.:

Wirkung anorganischer Zusätze auf das Erstarren und
Erhärten von Portlandzement

ZKG 26, (1973), 75 - 79

LOCHER, F.W.:

Die chemische Reaktion der Zementerhärtung

ZKG 17, (1964), 175 - 182

LOCHER, F.W.:

Erstarren und Anfangsfestigkeit von Zement

ZKG 26, (1973), 53 - 61

LOCHER, F.W. & RICHARTZ, W.:

Study of the hydration mechanism of cement

VI. Int. Congr. Chem. Cem., Moscow 1974

LOCHER, F.W., RICHARTZ, W. & SPRUNG, S.:

Erstarren von Zement

Teil I : Reaktion und Gefügeentwicklung

ZKG 29, (1976), 435 - 442

LUDWIG, U.:

Investigations on the hydration mechanism of clinker minerals
VI. Int. Cong. Chem. Cem., Moscow 1974

LUKAS, W.:

Die Ettringitphase in Zementhydratprodukten
Fortschr. Miner. 57, (1979), Beih. 1, 89 - 91

LUKAS, W.:

Betonzerstörung durch SO_3 - Angriff unter Bildung von
Thaumasit und Woodfordit
Cem. Concr. Res. 5, (1975), 503 - 518

LUKAS, W.:

Substitution of Si in the lattice of Ettringite
Cem. Concr. Res. 6, (1976), 225 - 234

MAJUMDAR, A.J. & ROY, R.:

The system $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{H}_2\text{O}$
J. Am. Ceram. Soc. 39, (1956), 434 - 442

MALQUORI, G. & CIRILLI, V.:

I ferriti di calcio idrati
Ric. Scient. 14, (1943), 78 - 84

MATHER, B.:

Guide for use of admixtures in concrete
J. Am. Concr. Inst. 68, (1971), 646 - 676

McCONNEL, D. & MURDOCH, J.:

Crystal chemistry of Ettringite
Min. Mag. 33, (1962), 59 - 64

MEHTA, P.K. & LESNIKOFF, G.:

Conversion of $\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ to $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
J. Am. Ceram. Soc. 54, (1971), 210 - 212

MEHTA, P.K.:

Stability of Ettringite on heating

J. Am. Ceram. Soc. 55, (1972), 55 - 56

MEHTA, P.K. & POLIVKA, M.:

Expansive cements

VI. Int. Congr. Chem. Cem., Moscow 1974

MEHTA, P.K.:

Scanning electron micrographic studies of Ettringite formation

Cem. Concr. Res. 6, (1976), 169 - 182

MEHTA, P.K.:

A reply to W.C. HANSEN's discussion of the paper: " Scanning electron micrographic studies of Ettringite formation"

Cem. Concr. Res. 6, (1976), 597 - 598

MICHAELIS, W.:

Der Cementbazillus

Tonind. Ztg. 16, (1892), 105 - 106

MIDGLEY, H.C.:

Quantitative determination of phases in high alumina cement clinkers by X-ray diffraction

Cem. Concr. Res. 6, (1976), 217 - 224

MIDGLEY, H.C. & RYDER, J.F.:

The relationship between mineral composition and strength development of high alumina cement

Cem. Concr. Res. 7, (1977), 669 - 672

MOENKE, H.:

Die Ultrarotabsorptionsspektren wasserhaltiger Bormineralien, des Howlits und des Danburits im Bereich von $400 - 1800 \text{ cm}^{-1}$

Jenaer Jahrb., Jena (1960), 191 - 215

MOENKE, H.:

Über Inderit und Kurnakovit

Jenaer Jahrb., Jena (1961), 239 - 247

MOENKE, H.:

Nachweis von BO_3 - und BO_4 - Gruppen in den häufigsten
natürlich gebildeten Silikaten

Silikattechnik 13, (1962), 287 - 288

MOENKE, H.:

Ein weiteres Mineral mit Silicium in 6er - Koordination:
Thaumasit

Nat. Wiss. 51, (1964), 239

MOORE, A. & TAYLOR, H.F.W.:

Crystal structure of Ettringite

Nature 218, (1968), 1048

MOORE, A. E. & TAYLOR, H.F.W.:

The crystal structure of Ettringite

Acta cryst. B 26, (1970), 386 - 393

MURDOCH, J. & CHALMERS, R.A.:

Ettringite ("Woodfordite") from Crestmore, California

Am. Miner. 45, (1960), 1275 - 1279

MYLIUS, C.H.W.:

Über Calciumaluminathydrate und deren Doppelsalze

Acta Acad. Aboensis (1933), Mathematica et Physica VII, 3

NACKEN, R. & MOSEBACH, R.:

Untersuchungen an den Vierstoffsystemen $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{CaCl}_2 - \text{H}_2\text{O}$
und $\text{CaO} - \text{SiO}_2 - \text{CaCl}_2 - \text{H}_2\text{O}$

Z. anorg. allgem. Chemie 228, (1936), 19 - 27

NAGAI, S.:

Hydrothermale Synthese von Calciumsilikaten

Z. anorg. Allgem. Chemie, 206, (1932), 177 - 195

NAGAI, S.:

Untersuchungen über die Hydrothermalsynthese von Calciumhydroaluminaten

Z. anorg. Allgem. Chemie, 207, (1932), 313 - 318

NAZIRIZADEH, M.:

Untersuchungen im Fünfstoffsystem $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{SO}_3 - \text{H}_2\text{O} - \text{Alkali}$

Dissertation Frankfurt/M. 1970

NEGRO, A. & STAFFERI, L.:

Über die Hydratation der Calciumferrite und Calciumaluminatferrite

ZKG 32, (1979), 83 - 88

NEWMAN, A.J.:

Effects of the addition of calciumchloride to the Portland cement concrete

Concr. and Construct. Engeneer. 38, (1943), 159 - 167

O'DANIEL, H. & KUZEL, H.-J.:

Neuere Ergebnisse der Strukturuntersuchungen von Zementmineralien

Fortschr. Miner. 41, (1963), 122 - 136

Offenlegungsschrift 2 114 081 (14.10.1977)

KOSSIVAS, T.G.

Verfahren zur Beschleunigung des Abbindens von Portlandzement sowie hierfür geeignete Mischungen

Offenlegungsschrift 1 771 911

CIMENTS LAFARGE, S.A., Paris (1972)

Verfahren zum Stabilisieren von Aluminiumoxyd- (Tonerde-) Zementen, danach erhaltene stabilisierte Zemente und ihre Anwendung

Offenlegungsschrift 2 433 363

DOSCH, W. & KOESTEL, H.C.:

Stabilisierte Dicalciumaluminathydrate

Offenlegungsschrift 2 600 769

DYCKERHOFF - Zementwerke AG

Verfahren zum Stabilisieren von Zementstein aus aluminatreichen Bindemitteln

PAULITSCH, P.:

Thaumasit im Basalt von Klösch

Aufschluß (1961), 266 - 268

PEACOR, D.R., DUNN, P.J. & DUGGAN, M.:

Sturmanite, a ferric Iron, Boron analogue of Ettringite
Can. Miner. 21, (1983), 705 - 709

PEPPLER, R.B. & WELLS, L.S.:

The system of lime, alumina and water from 50° to 250°C
J. Res. NBS 52, (1954), 75 - 92

PERCIVAL, A. & TAYLOR, H.F.W.:

The unit cell and space group of $4\text{CaO} \cdot 3\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$
Acta cryst. 14, (1961), 324

PLOWMAN, C. & CABRERA, J.G.:

Mechanism and kinetics of hydration of C_3A and C_4AF ,
extracted from cement

Cem. Concr. Res. 14, (1984), 238 - 248

PLYUSNINA, I.I. & KHARITNOV, Y.A.:

Crystallochemical properties and infrared absorption spectra of borates and borosilicates

J. Struct. Chem. 4, (1963), 506 - 516

PÖLLMANN, H.:

Mischkristallbildung in den Systemen $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ - $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaCO}_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ und $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ - $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$

Diplomarbeit Erlangen 1980

PÖLLMANN, H. & KUZEL, H.-J.:

Chloridhaltige Calciumaluminathydrate

Fortschr. Miner. 60, (1982), Beih. 1, 165 - 166

PÖLLMANN, H., WENDA, R. & KUZEL, H.-J.:

Neue Verbindungen mit Ettringitstruktur

Fortschr. Miner. 61, (1983), Beih. 1, 176 - 177

PÖLLMANN, H.:

Die Kristallchemie der Neubildungen bei Einwirkung von Schadstoffen auf hydraulische Bindemittel

Dissertation Erlangen 1984

PUNZET, M.:

Chemische und thermogravimetrische Stabilitätsuntersuchungen an Kalziumaluminathydraten

Dissertation Aachen 1973

REGOURD, M. & GUINIER, A.:

The crystal chemistry of the constituents of Portland cement clinker

VI. Int. Congr. Chem. Cem., Moscow 1974

REMY, H.:

Lehrbuch der anorganischen Chemie

Leipzig 1960

RICHARTZ, W.:

Die Bindung von Chlorid bei der Zement erhärtung

ZKG 22, (1969), 447 - 456

RIPAN, R. & LITEANU, C.:

Sur les solutions concentrées d'acide borique et phosphorique

Rev. Chim. , Acad. Rep. Pop. Roumanie, 1, (1956), 21 - 31

ROBERTS, M.H.:

Calcium Aluminate Hydrates and related basic salt

solid solutions

Proc. V. Int. Symp. Chem. Cem., Tokyo 1968, II-29, 104 - 117

RÖMPP:

Chemielexikon

Stuttgart 1962

ROSS, G.J. & KODAMA, H.:

Properties of a synthetic Magnesium Aluminium Carbonate

Hydroxide and its relationship to Magnesium Aluminium

double Hydroxide, Manasseite and Hydrotalkite

Am. Miner. 52, (1967), 1036 - 1047

ROSS, G.J. & KODAMA, H.:

Magnesium Aluminium Carbonate Hydroxide Tetrahydrate: A reply

Am. Miner. 53, (1968), 1059 - 1060

RCSS, S.D.:

The vibrational spectra of some minerals containing

tetrahedrally co-ordinated Boron

Spectrochim. Acta 28 A, (1972), 1555 - 1561

SADRAN, G. & COTTIN, B.:

Contribution to the study of complex aluminates

(Hydrated Calcium and Magnesium Monocarbaluminates)

Proc. V. Int. Symp. Chem. Cem., Tokyo 1968, II-15, 84 - 91

SATAVA, V. & VEPREK, O.:

Verfolgung hydrothormaler Reaktionen mittels
Differential - Thermoanalyse

I) Hydrothermale Reaktionen der Klinkerminerale

II) Reaktionen der Calciumaluminat mit Gips

ZKG 28, (1975), 170 - 173 bzw. 424 - 426

SCHÄFER, U.L. & KUZEL, H.-J.:

Kompatibilitätsbeziehungen und ternäre Verbindungen im
System $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{B}_2\text{O}_3$

N. Jb. Miner., Mh., (1967), 131 - 136

SCHÄFER, U.L.:

Untersuchungen im System $\text{CaO} - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{B}_2\text{O}_3 - \text{H}_2\text{O}$

N. Jb. Miner., Mh., (1968), 433 - 440

SCHÄFER, U.L.:

Synthese und röntgenographische Untersuchung der Borate

$3\text{CaO} \cdot \text{B}_2\text{O}_3$, $2\text{CaO} \cdot \text{B}_2\text{O}_3$ und $2\text{CaO} \cdot \text{B}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$

N. Jb. Miner., Mh., (1968), 75 - 80

SCHÄFFLER, H.:

Zusätze zu Beton

Betonstein - Ztg. 36, (1970), 547 - 553

SCHEETZ, B.E. & WHITE, W.B.:

Vibrational spectra of the alkaline earth double carbonates

Am. Miner. 62, (1977), 36 - 50

SCHIPPA, G.:

Reazione fra l'andride carbonica et il $3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{CaSO}_4 \cdot 32\text{H}_2\text{O}$

Ric. scient. 31, (1961), 204 - 211

SCHOLZE, H. & HILDEBRAND, U.:

Carbonat- und sulfathaltige Verbindungen bei der
Zementherstellung

ZKG 23, (1970), 573 - 579

SCHRADER, B.:

Chemische Anwendungen der Ramanspektroskopie
Angew. Chemie 85, (1973), 925 - 950

SCHUCKMANN, W.:

Zur Struktur des Calcium-Aluminium-Borates $\text{CaAl}(\text{O}/\text{BO}_3)$
N. Jb. Miner., Mh., (1968), 80 - 86

SCHWIETE, H.E. & LUDWIG, U.:

Crystal structures and properties of cement hydration products
(Hydrated calcium aluminates and ferrites)
Proc. V. Int. Symp. Chem. Cem., Tokyo 1968, II-2, 37 - 78

SCHWIETE, H.E., LUDWIG, U. & ALBECK, J.:

Bindung von Calciumchlorid und Calciumsulfat bei der
Hydratation der aluminatisch - ferritischen Klinkerbestandteile
ZKG 22, (1969), 225 - 235

SELIGMAN, P. & GREENING, R.:

Studies of early hydration reactions of Portland cement
by X-ray diffraction
Highway Res. Rec. 62, (1964), 80 - 105

SELIGMAN, P. & GREENING, R.:

Phase equilibria of cement - water
V. Int. Symp. Chem. Cem., Tokyo 1968, II, 179 - 202

SERB - SERBINA, Y.A., SAVVINA, V. & ZHURINA, V.:

The formation of hydrated calcium chloroaluminates and
their effect on the structure of cement pastes
Doklady, Akad. Nauk SSSR, 3, (1956), 659 - 662

SIEBERT, H.:

Anwendungen der Schwingungsspektroskopie in der anorganischen
Chemie
Berlin 1966

SIMON, G.:

Untersuchungen im System $4\text{CaO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot x\text{H}_2\text{O} - 3\text{C} \cdot 0. \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{CaCO}_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$
Diplomarbeit Erlangen 1984

SPRINGER, J.:

Über den Einbau von S^{6+} , Cr^{6+} und Se^{6+} in die Struktur des
Tricalciumaluminathexahydrats
Dissertation Erlangen 1976

zur STRASSEN, H.:

Hydratation des Zements
DYCKERHOFF Zementwerke 2, (1969)

STUKALOVA, N.P. & ANDREEVA, E.P.:

Influence of calcium chloride on chemical interaction in
aqueous suspensions of tricalcium aluminate
Kolloidnyi Zhurnal 30, (1968), 761 - 766

SWANSON, A.E.:

Aluminium - Calcium - Sulfat - Hydrate
NBS Circuits 539, (1958), 3 - 4

TALABER, J.:

High alumina cements
VI. Int. Congr. Chem. Cem., Moscow 1974

TARTE, P.:

Etude infrarouge du ferrite dicalcique $2\text{CaO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$ et
des solutions solides $2\text{CaO} \cdot (\text{Al}, \text{Fe})_2\text{O}_3$
Rev. Chim. min. 1, (1964), 425 - 438

TARTE, P.:

Infrared spectra of inorganic aluminates and characteristic
vibrational frequencies of AlO_4 tetraedra and AlO_6 octaedra
Spectrochim. Acta 23 A, (1967), 2127 - 2143

TAYLOR, H.F.W.:

The chemistry of cement Vol I, II
London 1964

TAYLOR, H.F.W.:

Crystal structures of some double hydroxide minerals
Min. Mag. 39, (1973), 377 - 389

TAYLOR, H.F.W.:

Crystal chemistry of Portland cement hydration products
VI. Int. Congr. Chem. Cem., Moscow 1974

TENNYSON, C.:

Eine Systematik der Borate auf kristallchemischer Grundlage
Fortschr. Miner. 41, (1963), 64 - 91

THOMAS, N.L. & BIRCHALL, J.D.:

The retarding action of sugars on cement hydration
Cem. Concr. Res. 13, (1983), 830 - 842

TILLEY, C.E., MEGAW, H.D. & HEY, M.H.:

Hydrocalumite, a new mineral from Scawt Hill, Co. Antrim
Min. Mag. 23, (1934), 607 - 615

TURRIZIANI, R. & SCHIPPA, G.:

Contributo alla conoscenza degli allumino - cloruro complessi
Ric. scient. 25, (1955), 3102 - 3106

TURRIZIANI, R. & SCHIPPA, G.:

Sull esistenza del monocarboaluminato di calcio idrato
Ric. scient. 26, (1956), 2792 - 2797

UCHIKAWA, H. & UCHIDA, S.:

Influence of boric acid on hydration of ultra rapid
hardening cement (in Jap.)
J. Res. Onoda Cem. Comp., Tokyo 29, (1977), 98, 43 - 51

VALYASHKO, M.G. & WLASSOVA, S.:

IR - Absorptionsspektren von Boraten und borhaltigen
wässrigen Lösungen

Jenaer Rundschau 14, (1969), 3 - 11

VAVRIN, F.:

Effect of chemical additions on hydration process and
hardening of cement

VI. Int. Congr. Chem. Cem., Moscow 1974

VENUAT, M.:

Adjuvants et traitements des mortiers et bétons
Paris 1971

VENUAT, M.:

Zusammensetzung und Wirkungsweise von Betonzusatzmitteln
Betonwerk- und Fertigteiltechnik 8, (1972), 571 - 580

VOLANT, J.:

Etude par spectrométrie infrarouge d'aluminates de calcium
hydratés

Rev. Mat. de Constr.

632 , (1968), 191 - 197

633 - 634, (1968), 257 - 272

635 - 636, (1968), 313 - 322

638 , (1968), 432 - 450

WANG, N.:

A structural proposal for the phase $B-Ca_2B_2O_4 \cdot 6H_2O$
N. Jb. Miner., Mh., (1971), 315 - 325

WEAST, R.C.:

CRC Handbook of chemistry and physics
Cleveland 1977/1978

WEIR, C.E. & LIPPINCOTT, E.R.:

Infrared studies of Aragonite, Calcite and Vaterite type structures in the Borates, Carbonates and Nitrates

J. Res. NBS 65 A, (1961), 173 - 183

WEIR, C.E. & SCHROEDER, R.A.:

Infrared spectra of the crystalline inorganic Borates

J. Res. NBS 68 A, (1964), 465 - 487

WELIN, E.:

The crystal structure of Thauasite $\text{Ca}_3\text{H}_2(\text{CO}_3/\text{SO}_4)\text{SiO}_4 \cdot 13\text{H}_2\text{O}$
Archiv för Mineralogi och Geologi 2, (1956), 137 - 147

WENDA, R.:

Über den Einbau von Bor in Calciumaluminathydrate

Diplomarbeit Erlangen 1980

WENDA, R. & KUZEL, H.-J.:

Über den Einbau von B^{3+} in Calciumaluminathydrate

Fortschr. Miner. (1983), Beih. 1, 217 - 218

WOODFORD, A.O.:

Crestmore minerals

California J. of mines a. geology 39, (1943), 333 - 365

ZIVICA, V.:

Über die korrosive Wirkung von Calciumnitrat - Lösungen
auf erhärtete Zementpaste

ZKG 24, (1971), 175 - 179

DANKSAGUNG

Die vorliegende Arbeit wurde am Institut für Geologie und Mineralogie der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg durchgeführt. Für die Überlassung des Themas und die stetige Betreuung bin ich Herrn Prof. Dr. H.-J. Kuzel zu herzlichem Dank verpflichtet. Für die Beratung und Unterstützung bei den Einkristallaufnahmen möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. H. Burzlaff bedanken. Herrn Prof. Dr. R. Schwab, Herrn Dipl. Min. H. Pöllmann und Herrn Dipl. Chem. H. Herold danke ich für viele wertvolle Diskussionen. Herrn Dipl. Phys. H. Kohler, dem Labor und der Werkstatt des Mineralogischen Institutes sei für manche Hilfestellung gedankt.

Weiterhin gilt mein Dank Herrn Dr. W.-Ch. Dullo für die Unterstützung bei den REM - Aufnahmen und Herrn Dipl. Chem. Dölfel für die Ramanspektroskopische Untersuchung. Schließlich sei allen Mitarbeitern des Institutes für ihr Interesse an meiner Arbeit gedankt.

LEBENS LAUF

Name : Johann Friedrich Richard Wenda
geboren am : 30. Mai 1955
in : Fürth / Bay.
Eltern : Josef Wenda, Rentner, früherer Werkmeister
: Karolina Wenda, geb. Schäfer, Hausfrau
Familienstand : verheiratet seit 15. Mai 1981
mit Andrea Wenda, geb. Vobel
Schulbildung : 1961 - 1965 Grundschule Fürth - Stadeln
: 1965 - 1974 Heinrich - Schliemann - Gymnasium
Fürth (neusprachl. Zweig)
: 22. 6. 1974 Reifezeugnis
Studium : 1974 - 1981 Universität Erlangen-Nürnberg
: 1974 - 1975 Physik/Mathematik für Lehramt
an Gymnasien
: 1975 - 1981 Mineralogie
: 27. 5. 1977 Vordiplom Mineralogie
: 14. 1. 1981 Diplom Mineralogie
Berufs-
tätigkeit : seit 15. 1. 1981 wissenschaftlicher Mitarbeiter
am Lehrstuhl für Mineralogie und Geologie der
Universität Erlangen-Nürnberg
daneben Durchführung der Promotion

MIKROFILMSERVICE  SELESCH DRUCK & VERLAG
Fliederweg 6 8521 Langensendelbach Telefon:09133/3338